

Capítulo 5

Simulação Dinâmica de Sistemas Granulares

5.1 – O Método de Elementos Distintos

O método de Monte Carlo, discutido nos capítulos anteriores, restringe-se à investigação de propriedades de sistemas em condições de equilíbrio, ou seja, em estados macroscopicamente invariáveis no tempo. No entanto, como foi relatado no Capítulo 1, grande parte das propriedades importantes de materiais granulares tem origem no seu comportamento dinâmico, o que torna necessária, em muitos casos, uma análise temporal do sistema abordado. Existem métodos que, similarmente às técnicas de Dinâmica Molecular, realizam esta tarefa através da integração, para cada partícula constituinte, das equações correspondentes à aplicação da 2ª Lei de Newton. Para isto, necessita-se de modelos matemáticos para as forças com as quais as partículas interagem entre si e com o ambiente. Tais métodos, por analogia, recebem a denominação genérica de **Dinâmica Granular**. Uma revisão da bibliografia recente, como a apresentada no Capítulo 2, mostra que as técnicas mais utilizadas atualmente são variantes do chamado **Método de Elementos Distintos** (*Distinct Element Method*), publicado em 1979 por Cundall e Strack, no qual as forças atuantes sobre as partículas são calculadas durante os contatos entre elas. Muito freqüentemente, o Método de Elementos Distintos é também referido como Método de Elementos Discretos (*Discrete Element Method*). Por questão de simplicidade e de conformidade com a literatura internacional, tal método será doravante referido através da acrosemia de sua denominação na língua inglesa: **DEM**.

As principais diferenças entre o DEM e a Dinâmica Molecular residem nas escalas de espaço e tempo características dos problemas abordados e, principalmente, na natureza das interações entre as partículas. Em última análise, as forças com as quais interagem as partículas granulares advêm de ações interatômicas, mas o imenso número de átomos que constituem cada grão inviabiliza o uso direto da Dinâmica Molecular, tornando necessária a utilização de modelos de interação específicos para a escala

granular. Tais modelos devem levar em conta a possibilidade de dissipação de energia mecânica, uma vez que, como explicado no Capítulo 1, este é um fator de influência crucial sobre o comportamento dinâmico de sistemas granulares. As diferenças entre os métodos trazem consigo grandes implicações, de forma que a implementação do DEM é mais que uma mera adaptação da Dinâmica Molecular. Na abordagem sugerida por Cundall e Strack (1979), primeiro admite-se que partículas em contato provoquem deformações mútuas e que estas sejam responsáveis pelas forças de interação, as quais são calculadas através dos modelos apropriados. Depois, assume-se que as partículas são corpos rígidos (indeformáveis) e, então, resolvem-se as equações diferenciais adequadas para a descrição dos seus movimentos. Este antagonismo em relação à deformabilidade das partículas revela-se apenas aparente, graças a uma aproximação utilizada na contabilização das deformações.

Internacionalmente, o DEM tem incorporado diversos avanços nos últimos anos, principalmente em relação à geometria das partículas e à modelagem das forças de interação entre elas. Com isto, ele tem sido usado na investigação dos mais diversos aspectos relativos a sistemas granulares (*Cf.* Capítulo 2). No âmbito nacional, contudo, o uso do DEM ainda é pouco difundido. No campo da Engenharia Química, não foi encontrado nenhum trabalho, publicado por pesquisadores atuantes no Brasil, que relatasse este tipo de abordagem.

Visa-se, na segunda parte desta tese, a concepção de um programa computacional para a simulação dinâmica de sistemas granulares através do DEM. Visa-se, também, uma descrição detalhada do método, reunindo-se informações resgatadas da literatura e apresentando-se novas propostas para o aprimoramento de alguns dos seus aspectos. Com isto, espera-se contribuir para a inserção desta promissora ferramenta em futuras pesquisas brasileiras a respeito de sistemas granulares. Neste trabalho, opta-se por modelar sistemas tridimensionais constituídos por partículas esféricas. Por questão de economia de esforço computacional, a grande maioria dos trabalhos publicados até o momento se vale de modelos bidimensionais, mas há uma tendência de mudança neste quadro, primeiramente porque certos comportamentos de sistemas granulares são intrinsecamente tridimensionais, e também devido ao grande avanço na capacidade de

processamento dos computadores atuais e à popularização de sistemas de computação paralela através de redes de microcomputadores (conhecidos como *Beowulf clusters*). Com respeito às forças de interação entre as partículas, em virtude do caráter inaugural desta etapa da tese, busca-se o emprego de modelos simples, que favoreçam a implementação e o teste da metodologia, mas tentando-se expor a mesma de uma maneira apropriada a facilitar futuros desenvolvimentos. O presente capítulo é dedicado a tal exposição, enquanto o Capítulo 6 se destina à apresentação de resultados de simulações realizadas com o programa implementado, de modo a ilustrar a sua aplicabilidade e o seu potencial.

Neste capítulo, opta-se por apresentar, primeiramente, uma breve revisão sobre a mecânica de corpos rígidos. Em seguida, determinam-se as equações do movimento específicas para os sistemas estudados. Então, apresentam-se os modelos empregados para cálculo das forças envolvidas e, por fim, discute-se sobre a resolução numérica das equações e sobre a implementação computacional do método. O final do capítulo contém uma breve discussão sobre diferentes modelos encontrados na literatura e sobre as tendências atuais do desenvolvimento e do uso da metodologia.

5.2 – Mecânica de Corpos Rígidos

A trajetória de um corpo no espaço é a representação das posições de todos os seus pontos materiais, relativas a um dado referencial, em função do tempo. De acordo com 2ª Lei de Newton, a taxa de variação do momento linear (produto entre a massa inercial e a velocidade) de cada ponto material de um corpo é igual à força resultante que age sobre ele. Portanto, para se descrever a trajetória de tal corpo, deve-se conhecer, em princípio, as forças com as quais todos os seus pontos materiais interagem entre si e com o ambiente. Entretanto, em certos casos, pode-se facilitar o tratamento através do conceito de **corpo rígido**. Um corpo rígido é aquele que jamais sofrerá deformação, independentemente das forças externas que atuem sobre ele. Em outras palavras, a distância entre dois pontos quaisquer de um corpo rígido é invariável. De fato, não existem na natureza objetos que se comportam desta maneira, mas este é um conceito teórico importante que viabiliza o tratamento matemático de muitos problemas práticos.

Detalhamentos sobre a mecânica de corpos rígidos podem ser encontrados em livros básicos de Mecânica Clássica. Neste trabalho, buscar-se-á uma descrição sucinta.

A descrição completa da trajetória de um corpo rígido pode ser realizada pelo seu desmembramento em duas parcelas: o movimento de translação de um de seus pontos materiais (que pode ser escolhido arbitrariamente) e o movimento de rotação dos demais pontos ao redor dele. Então, para um corpo rígido “i”, uma função vetorial $\mathbf{r}_i(t)$ pode representar a posição cartesiana do ponto de referência escolhido, em relação a um determinado referencial, a cada instante de tempo. A derivada desta função em relação ao tempo seria a velocidade de translação do ponto de referência do corpo “i” em relação ao mesmo referencial, representada por

$$\mathbf{v}_i = \frac{d\mathbf{r}_i}{dt}. \quad (5.2.1)$$

A rotação do corpo “i” ao redor do seu ponto de referência pode ser representada como aquela que ocorre em torno de um eixo que passa por tal ponto e que tem direção variável com o tempo. Entretanto, durante um período de tempo infinitesimal δt após um determinado instante t , pode-se imaginar que este eixo permanece fixo e, assim, representar a rotação através de um vetor $\delta\boldsymbol{\theta}_i$, cuja direção é igual à do eixo de rotação e cuja magnitude, $\delta\theta_i$, é igual ao ângulo infinitesimal percorrido. O sentido deste vetor, por sua vez, precisa ser definido por convenção. Adotando-se aquela seguida por Nussenzweig (1988, p. 363), o sentido de $\delta\boldsymbol{\theta}_i$ é escolhido de forma que “um observador com a cabeça na sua extremidade e os pés na sua origem, olhando para ‘baixo’, veria a rotação ocorrer no sentido anti-horário”. Devido ao conceito de corpo rígido, conclui-se que todos os pontos materiais do corpo “i” percorrem o mesmo ângulo $\delta\theta_i$ no intervalo considerado. Cabe ressaltar que esta representação vetorial somente é válida por se tratar de rotações infinitesimais, já que a adição de grandezas vetoriais deve ser comutativa e o mesmo não ocorre para rotações finitas em torno de eixos distintos (Nussenzweig, 1988, p. 75). Assim sendo, durante o período δt após o instante t , um ponto “p” qualquer do corpo “i” sofrerá um deslocamento $\delta\mathbf{s}_p$, dado por

$$\delta \mathbf{s}_p = \delta \mathbf{r}_i + \delta \boldsymbol{\theta}_i \times \mathbf{q}_{ip}, \quad (5.2.2)$$

onde $\delta \mathbf{r}_i$ é o deslocamento sofrido pelo ponto de referência do corpo “i” durante o intervalo δt e \mathbf{q}_{ip} é o vetor que, no instante t , liga tal ponto de referência, situado em \mathbf{r}_i , ao ponto “p”. O sinal “ \times ” representa um produto vetorial.

A velocidade de deslocamento do ponto “p” no instante t , $\mathbf{v}_p(t)$, corresponde à derivada $d\mathbf{s}_p/dt$ e pode ser obtida dividindo-se os dois lados da expressão acima por δt e, em seguida, fazendo-se $\delta t \rightarrow 0$, ou seja,

$$\mathbf{v}_p = \mathbf{v}_i + \boldsymbol{\omega}_i \times \mathbf{q}_{ip}, \quad (5.2.3)$$

onde \mathbf{v}_i é dada pela Equação (5.2.1) e $\boldsymbol{\omega}_i (=d\boldsymbol{\theta}_i/dt)$ é o vetor **velocidade angular** do ponto “p” (e, por conseguinte, de todos os pontos materiais do corpo “i”) em torno do eixo de rotação, no instante t . Vê-se que $\boldsymbol{\omega}_i$ tem a mesma direção e o mesmo sentido que $\delta \boldsymbol{\theta}_i$.

Esta simplificação na descrição cinemática obtida através do conceito de corpo rígido resulta em uma expressiva simplificação nas equações que regem o movimento geral de tal corpo. A aplicação da 2ª Lei de Newton a todos os pontos materiais de um corpo rígido pode ser representada através de apenas duas equações vetoriais, sendo uma para a translação do ponto de referência e outra para a rotação dos outros pontos em torno dele. Tais equações são

$$\frac{d\mathbf{p}_i}{dt} = \mathbf{F}_i^{\{\text{ext}\}} \quad \text{e} \quad (5.2.4)$$

$$\frac{d\mathbf{L}_i}{dt} = \boldsymbol{\tau}_i^{\{\text{ext}\}}. \quad (5.2.5)$$

Acima, \mathbf{p}_i é o momento linear do corpo “i”, \mathbf{L}_i é o seu momento angular, $\mathbf{F}_i^{\{\text{ext}\}}$ é a resultante das forças aplicadas sobre ele e $\boldsymbol{\tau}_i^{\{\text{ext}\}}$ é o torque total imposto por tais

forças. O momento linear do corpo “i” é definido como o produto entre sua massa inercial e a velocidade de deslocamento do seu ponto material de referência, ou seja,

$$\mathbf{p}_i = m_i \mathbf{v}_i. \quad (5.2.6)$$

O momento angular, por sua vez, é definido por

$$\mathbf{L}_i = I_i \boldsymbol{\omega}_i, \quad (5.2.7)$$

onde I_i é denominado de **momento de inércia** do corpo “i” em relação ao eixo de rotação, definido como

$$I_i = \int k_i^2 dm, \quad (5.2.8)$$

onde dm corresponde a um elemento de massa do corpo “i” e k_i ao raio de giração deste elemento, ou seja, à menor distância entre ele e o eixo de rotação. Note-se que, na definição acima, o corpo rígido é considerado como uma distribuição contínua de matéria.

A força resultante sobre o corpo “i”, $\mathbf{F}_i^{\{\text{ext}\}}$, é igual ao somatório de todas as forças aplicadas sobre ele, isto é,

$$\mathbf{F}_i^{\{\text{ext}\}} = \sum_p \mathbf{F}_{ip}, \quad (5.2.9)$$

onde o somatório é efetuado para cada ponto material “p” de “i” no qual alguma força externa é aplicada, sendo \mathbf{F}_{ip} o vetor que representa tal força.

Resta, então, definir o torque total imposto sobre o corpo “i”, que pode ser escrito como o somatório dos torques provocados por todas as forças \mathbf{F}_{ip} , ou seja,

$$\mathbf{\tau}_i^{\{ext\}} = \sum_p \mathbf{\tau}_{ip}, \quad (5.2.10)$$

$$\text{onde } \mathbf{\tau}_{ip} = \mathbf{q}_{ip} \times \mathbf{F}_{ip}. \quad (5.2.11)$$

Na equação acima, o vetor \mathbf{q}_{ip} é aquele que liga o ponto de referência do corpo rígido “i” ao ponto de aplicação da força \mathbf{F}_{ip} . Isto significa que os cálculos da força resultante e do torque resultante sobre determinado corpo rígido requerem o conhecimento de todas as forças externas atuantes sobre ele e dos pontos de aplicação de cada uma delas. Conseqüentemente, dispondo-se de modelos que forneçam estas propriedades, em cada instante de tempo, pode-se resolver as equações do movimento e traçar a trajetória do corpo em questão.

Como se pretende utilizar a formulação apresentada nesta seção para se realizar a análise dinâmica de sistemas constituídos por partículas granulares, os termos “corpo rígido” e “partícula” serão, nas próximas seções, utilizados indistintamente.

5.3 – Determinação das Equações do Movimento

Considere-se um sistema formado por N_p partículas cujas trajetórias, durante certo intervalo de tempo, devem ser delineadas. Embora, como será visto adiante, a abordagem do DEM seja irrestrita quanto à geometria das partículas, o presente trabalho se limita ao estudo do movimento de esferas. Admita-se, também, que estas não sofrem mudança de tamanho durante todo o intervalo considerado. Assim sendo, uma determinada partícula “i” pode ser caracterizada por um raio constante R_i e, supondo-se que a sua massa esteja uniformemente distribuída, conclui-se que o seu centro de massa coincide com o seu centro geométrico. Desta forma, atribui-se à partícula “i” uma densidade (massa por unidade de volume) constante ρ_i e toma-se como ponto material de referência o seu centro, cujas posição e velocidade de translação, em cada instante t , são referidas por funções vetoriais $\mathbf{r}_i(t)$ e $\mathbf{v}_i(t)$. Também em cada instante, todos os outros pontos materiais de “i” estarão realizando uma rotação em torno de um determinado eixo que passa por $\mathbf{r}_i(t)$. Conforme explicado na seção anterior, tal

rotação pode ser caracterizada por um vetor $\boldsymbol{\omega}_i(t)$. Sendo o volume de uma esfera “i” dado por

$$V_i = \frac{4}{3}\pi R_i^3, \quad (5.3.1)$$

sua massa será

$$m_i = V_i \rho_i = \frac{4}{3}\pi R_i^3 \rho_i. \quad (5.3.2)$$

Ao se resolver a integral da Equação (5.2.8) para uma partícula esférica “i” em rotação ao redor de um eixo que passa pelo seu centro (Nussenzveig, 1988, p. 408), tem-se o seu momento de inércia expresso por

$$I_i = \frac{2}{5} m_i R_i^2. \quad (5.3.3)$$

Portanto, sendo o raio e a densidade de uma esfera “i” constantes, sua massa e seu momento de inércia também o serão. Isto posto, as Equações (5.2.4) a (5.2.7) levam a

$$m_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \mathbf{F}_i^{\{\text{ext}\}} \quad \text{e} \quad (5.3.4)$$

$$I_i \frac{d\boldsymbol{\omega}_i}{dt} = \boldsymbol{\tau}_i^{\{\text{ext}\}}. \quad (5.3.5)$$

As expressões acima, juntamente com a Equação (5.2.1), são chamadas de “Equações do Movimento” da partícula esférica “i”, já que delas resultam as funções $\mathbf{r}_i(t)$, $\mathbf{v}_i(t)$ e $\boldsymbol{\omega}_i(t)$. Para que seja possível determinar, a partir das referidas equações, as trajetórias das N_p partículas do sistema, necessita-se, como foi mencionado anteriormente, de modelos que forneçam as forças que agem sobre cada partícula e os pontos de aplicação destas forças. Além disto, necessita-se que estes modelos dependam apenas de t , \mathbf{r}_i , \mathbf{v}_i e $\boldsymbol{\omega}_i$, para qualquer $i \in \{1, 2, \dots, N_p\}$.

Quanto à sua origem, é possível classificar as forças exercidas sobre uma determinada partícula “i” em dois tipos: aquelas que surgem de campos externos e aquelas oriundas de interações, seja com as outras $N_p - 1$ partículas ou com certos obstáculos presentes no sistema (neste trabalho, define-se como partícula todo corpo cuja trajetória é calculada através de equações diferenciais, e como obstáculo todo aquele cujo movimento é especificado *a priori*). As forças de campo podem ser provenientes da interação com o ambiente (forças gravitacional, hidrostática, elétrica ou magnética, por exemplo) ou podem ser as chamadas forças de inércia, que aparecem quando se utilizam referenciais acelerados (não-inerciais) para o tratamento matemático de um dado sistema (como as forças centrífugas ou de Coriolis, por exemplo). A resultante de todas as forças de campo sobre uma partícula “i” será denominada de $\mathbf{F}_i^{\{c\}}$.

No caso das forças de interação, duas categorias podem ser estabelecidas: forças de ação a distância e forças de contato. As da primeira categoria ocorrem com partículas que possuem momentos elétricos ou magnéticos, sejam permanentes ou temporários, podendo se atrair ou se repelir reciprocamente, mesmo não havendo contato entre elas. No caso de partículas de dimensões muito reduzidas, momentos elétricos instantâneos e aleatórios geram as chamadas forças de Van der Waals. As forças da segunda categoria, por sua vez, correspondem a compressões ou trações provocadas pelo contato entre partículas granulares. Denominando-se por \mathbf{F}_{ij} a força exercida por uma partícula “j” sobre uma partícula “i” e por \mathbf{F}'_{ik} aquela exercida por um obstáculo “k”, também sobre a mesma partícula “i”, expressa-se a força resultante sobre tal partícula por

$$\mathbf{F}_i^{\{ext\}} = \mathbf{F}_i^{\{c\}} + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{N_p} \mathbf{F}_{ij} + \sum_{k=1}^{N_{ob}} \mathbf{F}'_{ik}, \quad (5.3.6)$$

onde N_{ob} é o número total de obstáculos presentes no sistema.

Outra hipótese admitida neste trabalho é a de que a resultante das forças de campo sobre uma partícula “i” atue diretamente sobre o seu centro de massa. Neste caso, o

vetor \mathbf{q}_{ip} associado a ela (como consta na Equação (5.2.11)) é nulo e, conseqüentemente, tal resultante não produz torque sobre a partícula. No caso das forças de contato, sendo “i” uma esfera rígida, conclui-se que qualquer força \mathbf{F}_{ij} atua sobre um ponto que se situa na sua superfície. Neste caso, o vetor \mathbf{q}_{ij} , sendo aquele que liga o centro de massa de “i” ao ponto de aplicação de \mathbf{F}_{ij} , terá módulo igual a R_i . Se a sua direção e sentido forem os mesmos de um vetor unitário $\hat{\mathbf{n}}_{ij}$, pode-se escrever

$$\mathbf{q}_{ij} = R_i \hat{\mathbf{n}}_{ij}. \quad (5.3.7)$$

Analogamente, para o caso da força provocada por um obstáculo “k”, tem-se que

$$\mathbf{q}'_{ik} = R_i \hat{\mathbf{n}}'_{ik}. \quad (5.3.8)$$

Portanto, de acordo com a Equação (5.2.10), o torque total imposto sobre uma partícula “i” será dado por

$$\tau_i^{(ext)} = \sum_{j=1}^{N_j} (R_i \hat{\mathbf{n}}_{ij} \times \mathbf{F}_{ij}) + \sum_{k=1}^{N_k} (R_i \hat{\mathbf{n}}'_{ik} \times \mathbf{F}'_{ik}) = R_i \left[\sum_{j=1}^{N_j} (\hat{\mathbf{n}}_{ij} \times \mathbf{F}_{ij}) + \sum_{k=1}^{N_k} (\hat{\mathbf{n}}'_{ik} \times \mathbf{F}'_{ik}) \right]. \quad (5.3.9)$$

Em resumo, o estudo simultâneo das trajetórias das N_p partículas depende de modelos para $\mathbf{F}_i^{\{c\}}$, \mathbf{F}_{ij} , $\hat{\mathbf{n}}_{ij}$, \mathbf{F}'_{ik} e $\hat{\mathbf{n}}'_{ik}$, os quais serão abordados nas próximas seções. Além disto, a solução das equações do movimento requer a imposição de valores iniciais para todos os \mathbf{r}_i , \mathbf{v}_i e $\boldsymbol{\omega}_i$, os quais serão chamados, respectivamente, de $\mathbf{r}_i^{\{0\}}$, $\mathbf{v}_i^{\{0\}}$ e $\boldsymbol{\omega}_i^{\{0\}}$. Pode-se, então, de forma sumária, atrelar o estudo das N_p partículas em movimento à solução do seguinte sistema de equações diferenciais ordinárias:

$$i=1,2,\dots,N_p \quad \left\{ \begin{array}{l} \frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = \mathbf{v}_i \quad \text{com} \quad \mathbf{r}_i(0) = \mathbf{r}_i^{\{0\}} \\ \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \mathbf{a}_i \quad \text{com} \quad \mathbf{v}_i(0) = \mathbf{v}_i^{\{0\}} \\ \frac{d\boldsymbol{\omega}_i}{dt} = \boldsymbol{\alpha}_i \quad \text{com} \quad \boldsymbol{\omega}_i(0) = \boldsymbol{\omega}_i^{\{0\}} \end{array} \right. \quad (5.3.10)$$

onde \mathbf{a}_i e $\boldsymbol{\alpha}_i$ são, respectivamente, as acelerações translacional e angular de uma partícula “i”, dadas por

$$\mathbf{a}_i = \frac{\mathbf{F}_i^{\{\text{ext}\}}}{m_i} \quad \text{e} \quad (5.3.11)$$

$$\boldsymbol{\alpha}_i = \frac{\boldsymbol{\tau}_i^{\{\text{ext}\}}}{I_i}. \quad (5.3.12)$$

As acelerações definidas acima são calculadas a partir das Equações (5.3.1), (5.3.3), (5.3.6) e (5.3.9).

5.4 – Forças de Campo

O primeiro termo da resultante sobre uma partícula “i” a ser modelado é o correspondente às forças de campo. Neste trabalho, consideram-se apenas a ação da gravidade e o empuxo exercido por um fluido no qual a partícula esteja imersa. Assim, expressa-se o referido termo por

$$\mathbf{F}_i^{\{c\}} = \mathbf{F}_i^{\{g\}} + \mathbf{F}_i^{\{e\}}, \quad (5.4.1)$$

onde $\mathbf{F}_i^{\{g\}}$ é a força gravitacional e $\mathbf{F}_i^{\{e\}}$ é o empuxo. A primeira delas, sobre uma partícula esférica, é calculada através de

$$\mathbf{F}_i^{\{g\}} = m_i \mathbf{g} = \frac{4}{3} \pi R_i^3 \rho_i \mathbf{g}, \quad (5.4.2)$$

onde \mathbf{g} é a aceleração provocada pelo campo gravitacional. O empuxo exercido pelo fluido possui mesma direção e sentido inverso ao da força gravitacional, e sua magnitude é igual ao peso do fluido deslocado pela partícula, ou seja,

$$\mathbf{F}_i^{(e)} = -\frac{4}{3}\pi R_i^3 \rho_f \mathbf{g}, \quad (5.4.3)$$

onde ρ_f é a densidade do fluido circundante, considerada aqui como constante ao longo de todo o sistema. Substituindo-se as duas últimas expressões na Equação (5.4.1), pode-se reescrevê-la da seguinte forma:

$$\mathbf{F}_i^{(c)} = m_i^* \mathbf{g}, \quad (5.4.4)$$

onde m_i^* é chamada de **massa aparente** de uma partícula “i” imersa em um fluido de densidade ρ_f , definida por

$$m_i^* = \frac{4}{3}\pi R_i^3 (\rho_i - \rho_f). \quad (5.4.5)$$

É válido comentar que a presente modelagem para as forças de campo permite apenas a abordagem de sistemas nos quais o movimento do fluido não exerce significativa influência sobre o movimento das partículas. Caso contrário, necessitar-se-ia da inserção, na Equação (5.4.1), de um termo relativo a forças de arrasto, além da solução concomitante de equações referentes aos movimentos do fluido e das partículas. Embora isto não tenha sido efetuado neste trabalho, sugere-se, no Apêndice B, uma maneira simplificada de fazê-lo.

5.5 – Forças de Interação entre Partículas

Conforme mencionado anteriormente, as forças de interação entre duas partículas podem ocorrer a distância ou advir do contato entre elas. Entretanto, o presente estudo restringe-se a sistemas nos quais as partículas não interagem a distância. Deste modo,

atém-se à modelagem de forças de contato, as quais se manifestam quando ocorrem deformações locais nas partículas, seja por tração (quando há alguma forma de aderência), por compressão ou por fricção. No DEM, cada força é desmembrada em duas parcelas, sendo uma normal e outra tangencial a um determinado plano de contato, as quais são modeladas separadamente. Então, tem-se a força de interação entre duas partículas “i” e “j” dada por

$$\mathbf{F}_{ij} = \mathbf{F}_{ij}^{\{n\}} + \mathbf{F}_{ij}^{\{t\}}, \quad (5.5.1)$$

onde $\mathbf{F}_{ij}^{\{n\}}$ e $\mathbf{F}_{ij}^{\{t\}}$ são, respectivamente, as parcelas normal e tangencial da força de interação. A seguir, apresentam-se os modelos ora adotados, primeiramente para o caso da direção normal e, em seguida, para o da direção tangencial.

5.5.1 – Forças na Direção Normal ao Contato

Neste trabalho, admite-se que não haja qualquer tipo de aderência entre duas partículas na direção normal ao seu plano de contato (a ser definido adiante). Assim, neste caso, restringe-se à modelagem de forças de compressão. Na seção anterior, nenhum dos modelos adotados para forças de campo pressupunha mudanças estruturais ou geométricas nas partículas envolvidas. Por conseguinte, em nenhum momento o conceito de corpo rígido precisou ser deturpado, o que reforça a justificativa de sua utilização. A modelagem de forças de compressão, entretanto, exige maior cautela, já que se sabe que elas são provocadas, de fato, por deformações locais. Assim, parece contraditória, em princípio, a necessidade de calcular forças de compressão entre partículas tratadas como indeformáveis. Como um possível recurso, poder-se-ia considerar o modelo de partículas rígidas apenas nas equações do movimento, mas tratá-las como deformáveis durante o cálculo das forças de contato. Porém, uma abordagem detalhada das deformações poderia ser extremamente complexa, inviabilizando a análise dinâmica de um sistema granular com muitas partículas. A solução deste problema constitui o cerne do Método de Elementos Distintos. Segundo Cundall e Strack (1979), “as deformações das partículas individuais são pequenas em comparação à deformação do leito granular, como um todo. Esta última deformação

ocorre, primariamente, devido ao movimento das partículas como corpos rígidos. Portanto, uma modelagem acurada da deformação de uma partícula não é necessária para se obter uma boa aproximação do comportamento mecânico do sistema”. Baseando-se nestes argumentos, pode-se buscar uma forma aproximada e simples de calcular as forças provocadas pelas citadas deformações locais. A alternativa proposta por Cundall e Strack (1979) constitui-se em manter o tratamento das partículas como corpos rígidos, mas permitir que haja pequenas interpenetrações entre elas, relacionando-se, então, a magnitude de uma deformação à profundidade da interpenetração correspondente. Em sua essência, esta aproximação se assemelha ao próprio conceito de corpo rígido, pois, embora se baseie em um expediente antinatural, mostra-se útil por viabilizar o estudo de certos sistemas cujo tratamento, de outra forma, seria impraticável. Além disto, basta o mero uso do termo “interpenetração”, em lugar de “deformação”, para que se desfça a aparente contradição em se calcular forças de compressão entre corpos rígidos.

A partir do esquema da Figura 5.5.1, conclui-se que duas partículas esféricas “i” e “j” interpenetrar-se-ão se a distância entre seus centros for menor ou igual à soma de seus raios, ou seja, se

$$\|\mathbf{r}_{ij}\| \leq R_i + R_j, \quad (5.5.2)$$

onde $\|\mathbf{r}_{ij}\|$ é a norma do vetor que liga o centro de “i” ao centro de “j”, dado por

$$\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i. \quad (5.5.3)$$

Uma vez que a modelagem aqui apresentada se restringe a forças de compressão, determina-se que um par qualquer “ij” estará interagindo em determinado instante se, e somente se, a Condição (5.5.2) for satisfeita. Caso contrário, a força \mathbf{F}_{ij} poderá ser, de imediato, considerada nula. Portanto, os modelos a serem apresentados nesta seção serão válidos, exclusivamente, para os pares de partículas que se enquadrarem na referida condição.

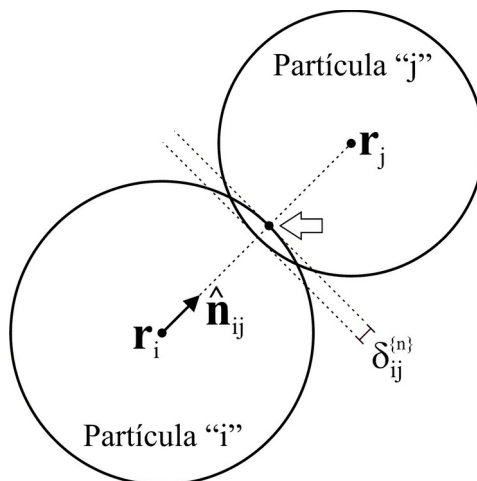


Figura 5.5.1 – Esquema para cálculo da interpenetração entre partículas esféricas.

Em cada instante do período de contato entre “i” e “j”, define-se o **plano de contato** como aquele perpendicular a um vetor unitário $\hat{\mathbf{n}}_{ij}$ (vide Figura 5.5.1), com direção e sentido iguais aos de \mathbf{r}_{ij} , ou seja,

$$\hat{\mathbf{n}}_{ij} = \frac{\mathbf{r}_{ij}}{\|\mathbf{r}_{ij}\|}. \quad (5.5.4)$$

Assim, $\hat{\mathbf{n}}_{ij}$ é denominado de vetor normal ao plano de contato entre “i” e “j”. Considerando-se que o ponto material de “i” no qual se aplica a força de contato seja aquele de máxima penetração em “j”, tal como o ponto indicado por uma seta branca na Figura 5.5.1, tem-se que o vetor $\hat{\mathbf{n}}_{ij}$ é, justamente, aquele que aparece na Equação (5.3.7), necessário para se calcular o torque imposto sobre a partícula “i”. O **deslocamento normal** (ou seja, na direção de $\hat{\mathbf{n}}_{ij}$) do par “ij” em relação à sua condição de simples toque é simbolizado por $\delta_{ij}^{\{n\}}$ e definido como

$$\delta_{ij}^{\{n\}} = R_i + R_j - \|\mathbf{r}_{ij}\|. \quad (5.5.5)$$

Devido à Condição (5.5.2), o valor de $\delta_{ij}^{\{n\}}$ será positivo enquanto houver contato entre “i” e “j”. Então, utiliza-se tal valor como uma medida da magnitude da interpenetração entre as partículas. Conforme a metodologia de Cundall e Strack (1979),

tal interpenetração faz surgir uma força de compressão cujo módulo é diretamente proporcional ao valor (positivo) de $\delta_{ij}^{\{n\}}$ e cuja direção é idêntica à do vetor \mathbf{r}_{ij} , ou seja,

$$\mathbf{F}_{ij}^{\{n,e\}} = -k_{ij}^{\{n\}} \delta_{ij}^{\{n\}} \hat{\mathbf{n}}_{ij}, \quad (5.5.6)$$

onde $k_{ij}^{\{n\}}$ é um parâmetro específico do par “ij”, correspondente à força necessária para se impor um determinado grau de interpenetração entre as partículas. Por definição, seu valor é sempre positivo e, devido a isto, o sinal negativo na expressão acima denota que $\mathbf{F}_{ij}^{\{n,e\}}$ é exercida no sentido oposto ao de $\hat{\mathbf{n}}_{ij}$, ou seja, trata-se de uma força puramente repulsiva. Por depender, de fato, apenas da distância entre os centros das partículas, a força dada pela Equação (5.5.6) é conservativa, pois o trabalho realizado por ela, em um determinado período de contato, é função apenas das distâncias inicial e final (Nussenveig, 1981, p. 185). Isto explica, então, o uso do sobrescrito {n,e}, que classifica a força em questão como normal e elástica (conservativa).

O modelo representado pela Equação (5.5.6) é o mesmo que descreve um sistema formado por duas massas que comprimem uma mola, como mostra a Figura 5.5.2. Nesta, a mola não está permanentemente atada aos corpos, de forma a demonstrar o caráter puramente repulsivo do modelo. De acordo com a chamada “Lei de Hooke”, a força aplicada em ambos os lados da mola é proporcional à sua deformação em relação ao comprimento de equilíbrio (o que é válido para pequenas deformações). Devido a isto, a constante $k_{ij}^{\{n\}}$ é usualmente chamada de “constante de mola” do par “ij”.

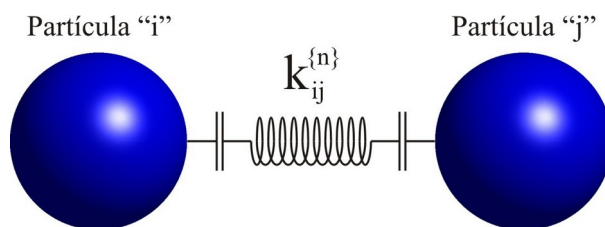


Figura 5.5.2 – Modelo do tipo “mola” para força elástica normal.

Como consta no Capítulo 1 desta tese, sabe-se que grande parte dos fenômenos observados em sistemas granulares sobrevivem de dissipações de energia ocorridas durante os choques entre as partículas. Desta forma, convém introduzir ao modelo uma nova parcela que seja capaz de contabilizar tais dissipações. A estratégia adotada por Cundall e Strack (1979), neste caso, foi adicionar um termo proporcional à componente normal da velocidade relativa entre os pontos de contato das duas partículas. O emprego deste tipo de dissipação é bastante comum no estudo de oscilações amortecidas (Nussenzveig, 1990, p. 115). De acordo com a Equação (5.2.3), as velocidades de deslocamento do ponto de contato da partícula “i” com a “j” ($\mathbf{v}_i^{\{c,j\}}$) e do ponto de contato da partícula “j” com “i” ($\mathbf{v}_j^{\{c,i\}}$), ambas no instante t, são dadas por

$$\mathbf{v}_i^{\{c,j\}} = \mathbf{v}_i + \boldsymbol{\omega}_i \times \mathbf{q}_{ij} = \mathbf{v}_i + \boldsymbol{\omega}_i \times (R_i \hat{\mathbf{n}}_{ij}) = \mathbf{v}_i + R_i \boldsymbol{\omega}_i \times \hat{\mathbf{n}}_{ij} \quad \text{e} \quad (5.5.7)$$

$$\mathbf{v}_j^{\{c,i\}} = \mathbf{v}_j + \boldsymbol{\omega}_j \times \mathbf{q}_{ji} = \mathbf{v}_j + \boldsymbol{\omega}_j \times (R_j \hat{\mathbf{n}}_{ji}) = \mathbf{v}_j - R_j \boldsymbol{\omega}_j \times \hat{\mathbf{n}}_{ij}, \quad (5.5.8)$$

pois $\hat{\mathbf{n}}_{ji} = -\hat{\mathbf{n}}_{ij}$. Então, sendo $\mathbf{v}_{ij} = \mathbf{v}_j - \mathbf{v}_i$, a velocidade relativa no contato entre “i” e “j” é fornecida por

$$\mathbf{v}_{ij}^{\{c\}} = \mathbf{v}_j^{\{c,i\}} - \mathbf{v}_i^{\{c,j\}} = \mathbf{v}_{ij} - (R_j \boldsymbol{\omega}_j + R_i \boldsymbol{\omega}_i) \times \hat{\mathbf{n}}_{ij}. \quad (5.5.9)$$

Assim, a componente normal de $\mathbf{v}_{ij}^{\{c\}}$ é dada por

$$\mathbf{v}_{ij}^{\{c,n\}} = \mathbf{v}_{ij}^{\{c\}} \cdot \hat{\mathbf{n}}_{ij} \hat{\mathbf{n}}_{ij}, \quad (5.5.10)$$

onde $\mathbf{v}_{ij}^{\{c,n\}}$ é a projeção de $\mathbf{v}_{ij}^{\{c\}}$ na direção de $\hat{\mathbf{n}}_{ij}$, isto é,

$$\mathbf{v}_{ij}^{\{c,n\}} = \mathbf{v}_{ij}^{\{c\}} \cdot \hat{\mathbf{n}}_{ij} \hat{\mathbf{n}}_{ij} = \mathbf{v}_{ij} \cdot \hat{\mathbf{n}}_{ij} \hat{\mathbf{n}}_{ij} - \left[(R_j \boldsymbol{\omega}_j + R_i \boldsymbol{\omega}_i) \times \hat{\mathbf{n}}_{ij} \right] \cdot \hat{\mathbf{n}}_{ij} \hat{\mathbf{n}}_{ij}. \quad (5.5.11)$$

Como $(\mathbf{a} \times \mathbf{b}) \cdot \mathbf{b} = 0$ para quaisquer vetores \mathbf{a} e \mathbf{b} , a expressão acima se resume

a

$$\mathbf{v}_{ij}^{\{c,n\}} = \mathbf{v}_{ij} \cdot \hat{\mathbf{n}}_{ij}. \quad (5.5.12)$$

Assim, a força de dissipação normal ($\mathbf{F}_{ij}^{\{n,d\}}$) é dada por

$$\mathbf{F}_{ij}^{\{n,d\}} = +\eta_{ij}^{\{n\}} \mathbf{v}_{ij}^{\{c,n\}} = +\eta_{ij}^{\{n\}} \mathbf{v}_{ij}^{\{c,n\}} \hat{\mathbf{n}}_{ij}, \quad (5.5.13)$$

onde $\eta_{ij}^{\{n\}}$ é chamado de **coeficiente de resistência dissipativa** ou **constante de amortecimento** do par “ij” na direção normal ao contato, que atua em busca de reduzir o módulo da velocidade relativa. Se $\mathbf{v}_{ij}^{\{c,n\}}$ é negativo, então $\mathbf{v}_{ij}^{\{c,n\}}$ tem sentido oposto ao de $\hat{\mathbf{n}}_{ij}$ ou, em outras palavras, a partícula “j” se aproxima da partícula “i”. Assim, esta exerce sobre “j” uma força $\mathbf{F}_{ij}^{\{n,d\}}$, oposta a $\mathbf{v}_{ij}^{\{c,n\}}$, de forma a desacelerar o seu movimento de aproximação. Como, pela 3ª Lei de Newton, $\mathbf{F}_{ji}^{\{n,d\}} = -\mathbf{F}_{ij}^{\{n,d\}}$, conclui-se que $\mathbf{F}_{ij}^{\{n,d\}}$ deve atuar no mesmo sentido de $\mathbf{v}_{ij}^{\{c,n\}}$, o que justifica o sinal positivo da expressão acima e a adoção de valores de $\eta_{ij}^{\{n\}}$ exclusivamente positivos.

Finalmente, somando-se as parcelas elástica e dissipativa, obtém-se a força total na direção normal ao contato entre duas partículas “i” e “j” como

$$\mathbf{F}_{ij}^{\{n\}} = \mathbf{F}_{ij}^{\{n,e\}} + \mathbf{F}_{ij}^{\{n,d\}} = (-k_{ij}^{\{n\}} \delta_{ij}^{\{n\}} + \eta_{ij}^{\{n\}} \mathbf{v}_{ij}^{\{c,n\}}) \hat{\mathbf{n}}_{ij}. \quad (5.5.14)$$

O modelo acima assemelha-se àquele que descreve a força exercida na compressão, para pequenos deslocamentos em relação à posição de equilíbrio, de um dispositivo do tipo “mola-pistão” (*spring-dashpot*) em paralelo, como mostrado na Figura 5.5.3. Devido à sua simplicidade, tal modelo é largamente utilizado em livros didáticos de física para o estudo de oscilações amortecidas (Nussenzveig, 1990, p. 115). Tal simplicidade também é útil para o tipo de estudo proposto neste trabalho, pois permite a solução analítica do movimento de um sistema idealizado: um par isolado de partículas que colide frontalmente e sem a influência de forças externas. Esta solução, apresentada no Apêndice C, facilita a interpretação física e a seleção de valores para os parâmetros do modelo e, adicionalmente, fornece uma noção das escalas de tempo

envolvidas em sistemas mais complexos, ou seja, com múltiplas partículas e sob a ação de forças externas.

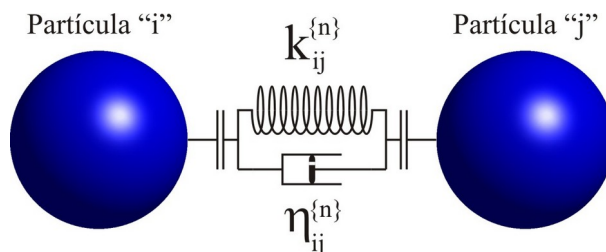


Figura 5.5.3 – Modelo do tipo “mola-pistão” (*spring-dashpot*) para força normal.

No Apêndice C, demonstra-se que a duração de uma colisão, no caso mencionado no parágrafo anterior, é independente da velocidade relativa entre as duas partículas, e pode ser calculada através de

$$\Delta t_{ij} = \frac{2\pi m_{ij}}{\sqrt{4m_{ij}k_{ij}^{\{n\}} - (\eta_{ij}^{\{n\}})^2}}, \quad (5.5.15)$$

onde m_{ij} é a massa reduzida do par “ij”, isto é,

$$m_{ij} = \frac{m_i m_j}{m_i + m_j}. \quad (5.5.16)$$

Com isto, pode-se determinar *a priori* a duração de possíveis colisões entre todos os pares de partículas envolvidos em uma simulação, o que fornece uma base para a determinação do passo de integração a ser utilizado na solução numérica das equações do movimento. Já em relação à fixação de parâmetros, assim como sugerido por Tsuji *et al.* (1993), pode-se obter a constante de amortecimento de um par “ij” ($\eta_{ij}^{\{n\}}$) a partir de um outro parâmetro, de interpretação física mais pertinente ao caso de partículas em colisão, chamado de **coeficiente de restituição**. Tal parâmetro é definido, para um par isolado de partículas, como a razão entre as suas velocidades relativas calculadas imediatamente depois e imediatamente antes da colisão. Assim, sabendo-se que as

partículas se chocam em um instante $t_{ij}^{\{0\}}$, define-se o coeficiente de restituição do par “ij”, na direção normal ao contato, como

$$e_{ij}^{\{n\}} = - \frac{v_{ij}^{\{c,n\}}(t_{ij}^{\{0\}} + \Delta t_{ij})}{v_{ij}^{\{c,n\}}(t_{ij}^{\{0\}})} . \quad (5.5.17)$$

O sinal negativo da equação acima é necessário para que o valor de $e_{ij}^{\{n\}}$ seja positivo, já que o sentido da velocidade relativa se inverte durante a colisão. Além disto, para que a energia cinética total do par não aumente devido ao choque, tem-se que $e_{ij}^{\{n\}} \leq 1$, onde o limite superior corresponde a colisões elásticas. A correlação entre a constante de amortecimento e o coeficiente de restituição é também obtida no Apêndice C, podendo ser expressa da seguinte maneira:

$$\eta_{ij}^{\{n\}} = -2 \ln e_{ij}^{\{n\}} \sqrt{\frac{m_{ij} k_{ij}^{\{n\}}}{\pi^2 + (\ln e_{ij}^{\{n\}})^2}} . \quad (5.5.18)$$

Experimentalmente, observa-se que o coeficiente de restituição não depende somente das propriedades materiais dos corpos colidentes, mas também da velocidade de impacto entre eles (Dong e Moys, 2003). Contudo, o modelo linear apresentado não admite tal dependência, já que os coeficientes de amortecimento são tidos como constantes. Além desta, há outras características não-físicas no modelo adotado. Por exemplo, espera-se que, durante o contato entre duas partículas colidentes, o módulo da força de interação seja inicialmente nulo e, então, aumente até atingir um máximo, de onde decresce até se anular novamente no final da colisão (Zhang e Whiten, 1996). Entretanto, este comportamento não é descrito pelo modelo em questão, como pode ser demonstrado através de uma análise da expressão obtida no Apêndice C para a evolução temporal da força durante a colisão frontal de um par isolado [Equação (C.18)]. A Figura 5.5.4 mostra um gráfico típico de $F_{ij}^{\{n\}}$ versus \hat{t} (onde $F_{ij}^{\{n\}} = \mathbf{F}_{ij}^{\{n\}} \cdot \hat{\mathbf{n}}_{ij}$ e $\hat{t} = t - t_{ij}^{\{0\}}$), obtido com o auxílio de tal expressão. Observa-se que, ao contrário do esperado, a força de interação não é nula quando $\delta_{ij}^{\{n\}} = 0$, ou seja, no início ($\hat{t} = 0$) e

no final da colisão ($\hat{t} = \Delta t_{ij}$). Através das Equações (5.5.14) e (5.5.17), conclui-se que tais forças inicial e final são iguais a $\eta_{ij}^{\{n\}} v_{ij}^{\{c,n\}}(t_{ij}^{\{0\}})$ e $-\eta_{ij}^{\{n\}} e_{ij}^{\{n\}} v_{ij}^{\{c,n\}}(t_{ij}^{\{0\}})$, respectivamente. Além disto, a Figura 5.5.4 mostra que a força é repulsiva (negativa) no início do contato, passa por um ponto de máxima intensidade (mínimo valor absoluto) e depois se anula, antes do final da colisão. Após este ponto de nulidade, a força troca de sinal e passa a ter caráter atrativo, o que vai de encontro à premissa de que se está modelando, exclusivamente, forças de compressão. Alguns destes resultados anômalos do modelo linear foram discutidos por Zhang e Whiten (1996). Contudo, diversos trabalhos foram realizados a partir deste modelo, levando a resultados que reproduzem, ao menos qualitativamente, importantes comportamentos de sistemas granulares.

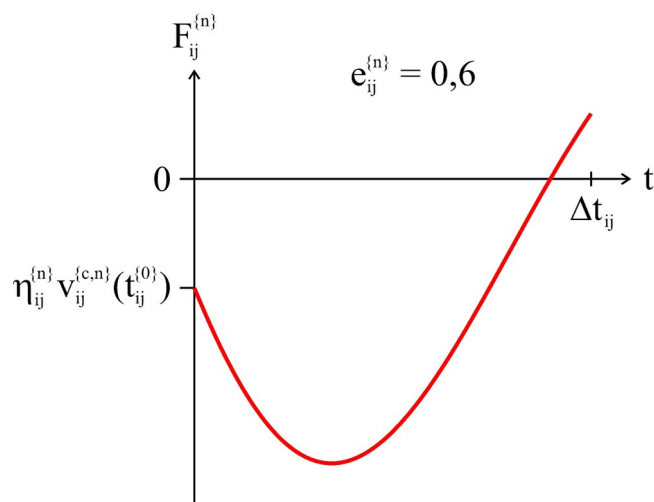


Figura 5.5.4 – Força calculada através do modelo “mola-pistão” durante a colisão de um par isolado com coeficiente de restituição igual a 0,6.

Vários autores, visando transcrever mais apuradamente a força normal de interação entre partículas em contato, têm proposto alternativas ao modelo recém-apresentado, algumas das quais serão discutidas no final deste capítulo. Entretanto, salienta-se que os objetivos presente trabalho consistem na implementação do DEM, no seu aperfeiçoamento como algoritmo e na demonstração da sua potencialidade para estudo de sistemas de interesse da Engenharia Química. Neste sentido, a adoção de uma formulação simplificada se justifica e, portanto, o modelo apresentado é satisfatório.

Por último, resta afirmar que a parcela normal da força de contato não depende das velocidades angulares das partículas envolvidas. Além disto, a partir das Equações (5.2.11) e (5.3.7), vê-se que o torque imposto sobre ela é nulo, pois

$$\mathbf{r}_{ij}^{\{n\}} = \mathbf{q}_{ij} \times \mathbf{F}_{ij}^{\{n\}} = R_i \hat{\mathbf{n}}_{ij} \times \left[\left(-k_{ij}^{\{n\}} \delta_{ij}^{\{n\}} + \eta_{ij}^{\{n\}} \mathbf{v}_{ij}^{\{c,n\}} \right) \hat{\mathbf{n}}_{ij} \right] = \mathbf{0}. \quad (5.5.19)$$

Desta maneira, se não houver outros tipos de interação, não haverá acelerações angulares e, por conseguinte, as partículas permanecerão com velocidade angular invariável. Este caso corresponde a partículas perfeitamente lisas, o que, na prática, não é observado em sistemas granulares. Este problema é suplantado através da modelagem de forças de atrito entre as partículas, o que será efetuado a seguir.

5.5.2 – Forças na Direção Tangencial ao Contato

As forças de atrito entre duas partículas são aquelas exercidas em direções paralelas ao plano de contato e, por isto, são classificadas como “tangenciais”. Em princípio, para se modelar uma força deste tipo, pode-se adotar uma expressão análoga à Equação (5.5.14), que possui componentes elástica e dissipativa. Porém, a direção normal é única, enquanto existem infinitas direções tangenciais. Neste caso, é possível que as referidas componentes tenham orientações distintas, o que leva a se adotar a seguinte expressão para a força de atrito entre duas partículas “i” e “j”:

$$\mathbf{F}_{ij}^{\{t\}} = \mathbf{F}_{ij}^{\{t,e\}} + \mathbf{F}_{ij}^{\{t,d\}} = -k_{ij}^{\{t\}} \boldsymbol{\delta}_{ij}^{\{t\}} + \eta_{ij}^{\{t\}} \mathbf{v}_{ij}^{\{c,t\}}, \quad (5.5.20)$$

onde as variáveis têm interpretação análoga às presentes na Equação (5.5.14). O vetor $\boldsymbol{\delta}_{ij}^{\{t\}}$ corresponde ao **deslocamento tangencial** experimentado pelos pontos de contato de “i” e “j”, desde o momento inicial do contato até o instante considerado. O vetor $\mathbf{v}_{ij}^{\{c,t\}}$, por sua vez, denota a componente tangencial da velocidade relativa entre tais pontos de contato. Tais vetores não possuem, obrigatoriamente, a mesma direção, mas ambos devem ser perpendiculares ao vetor $\hat{\mathbf{n}}_{ij}$, de forma que a força calculada pela equação acima também o seja.

Em princípio, restaria apenas saber como se calculam os vetores $\delta_{ij}^{\{t\}}$ e $\mathbf{v}_{ij}^{\{c,t\}}$ associados a cada par “ij” em contato. No caso de $\mathbf{v}_{ij}^{\{c,t\}}$, basta extrair da velocidade relativa no contato, dada pela Equação (5.5.9), a sua componente normal, de modo que

$$\mathbf{v}_{ij}^{\{c,t\}} = \mathbf{v}_{ij}^{\{c\}} - \mathbf{v}_{ij}^{\{c,n\}} = \mathbf{v}_{ij}^{\{c\}} - v_{ij}^{\{c,n\}} \hat{\mathbf{n}}_{ij}. \quad (5.5.21)$$

O cálculo do deslocamento tangencial, entretanto, não é tão simples como no caso da direção normal. A primeira dificuldade é que não se conhece nenhuma propriedade configuracional* de um sistema de partículas rígidas, tal como é o deslocamento normal, à qual se possa comparar uma deformação tangencial. A segunda dificuldade, por sua vez, reside no fato de que a orientação do plano tangencial muda continuamente e, como mencionado, o vetor $\delta_{ij}^{\{t\}}$ deve ser sempre paralelo a ele. Uma terceira dificuldade é que, segundo a Lei do Atrito de Coulomb, existe um limite máximo para o módulo de $\mathbf{F}_{ij}^{\{t\}}$ em cada instante, expresso por

$$\|\mathbf{F}_{ij}^{\{t\}}\|_{\text{máx}} = \mu_{ij} \|\mathbf{F}_{ij}^{\{n\}}\|, \quad (5.5.22)$$

onde μ_{ij} é chamado de **coeficiente de atrito** do par “ij”. No instante em que $\mathbf{F}_{ij}^{\{t\}}$ atinge tal limite, inicia-se um deslizamento entre as partículas, durante o qual se admite que o módulo da força de atrito seja sempre igual a $\mu_{ij} \|\mathbf{F}_{ij}^{\{n\}}\|$.

Tomando-se como base o próprio trabalho de Cundall e Strack (1979) e visando-se suplantear as mencionadas dificuldades, propõe-se uma abordagem na qual o cálculo de $\mathbf{F}_{ij}^{\{t\}}$ é efetuado de forma incremental. Para isto, toma-se uma variação infinitesimal de tal força que, de acordo com a Equação (5.5.21), é dada por

$$d\mathbf{F}_{ij}^{\{t\}} = -k_{ij}^{\{t\}} d\delta_{ij}^{\{t\}} + \eta_{ij}^{\{t\}} d\mathbf{v}_{ij}^{\{c,t\}}. \quad (5.5.23)$$

* Uma propriedade configuracional é toda aquela que não depende das trajetórias das partículas, mas apenas das suas posições e velocidades instantâneas.

Assim sendo, a citada primeira dificuldade se traduz na definição da variação infinitesimal $d\delta_{ij}^{\{t\}}$. Mesmo não havendo uma propriedade configuracional adequada para tanto, é possível recorrer-se a uma analogia ao caso do deslocamento normal, definido pela Equação (5.2.4), cuja derivada no tempo é dada por

$$\frac{d\delta_{ij}^{\{n\}}}{dt} = - \frac{d \|\mathbf{r}_{ij}\|}{dt} = - \frac{1}{2 \|\mathbf{r}_{ij}\|} \frac{d(\mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{r}_{ij})}{dt} = - \frac{1}{2 \|\mathbf{r}_{ij}\|} 2\mathbf{r}_{ij} \cdot \frac{d\mathbf{r}_{ij}}{dt} = - \frac{\mathbf{r}_{ij}}{\|\mathbf{r}_{ij}\|} \cdot \frac{d\mathbf{r}_{ij}}{dt}. \quad (5.5.24)$$

Observando-se o desenvolvimento acima, juntamente com as Equações (5.2.1), (5.5.4) e (5.5.12), conclui-se que $d\delta_{ij}^{\{n\}} = - \mathbf{v}_{ij}^{\{c,n\}} dt$. Então, por analogia, impõe-se que

$$d\delta_{ij}^{\{t\}} = - \mathbf{v}_{ij}^{\{c,t\}} dt. \quad (5.5.25)$$

A definição acima tem validade somente quando não há deslizamento. Quando há, porém, torna-se ainda mais difícil definir $d\delta_{ij}^{\{t\}}$, pois a evolução de $\mathbf{F}_{ij}^{\{t\}}$, neste caso, deve ser tal que o seu módulo acompanhe o valor de $\mu_{ij} \|\mathbf{F}_{ij}^{\{n\}}\|$. Como solução, recorre-se ao procedimento descrito a seguir. Primeiramente, admite-se que o valor de $\mathbf{F}_{ij}^{\{t\}}$ em um instante anterior, $t - \Delta t$, é conhecido. Então, se Δt for suficientemente pequeno, supõe-se que não houve deslizamento durante este intervalo, o que permite a integração de Equação (5.5.23) usando-se a definição dada na (5.5.25), ou seja,

$$\int_{\mathbf{F}_{ij}^{\{t\}}}^{\widetilde{\mathbf{F}}_{ij}^{\{t\}}} d\mathbf{F}_{ij}^{\{t\}} = \mathbf{k}_{ij}^{\{t\}} \int_{t-\Delta t}^t \mathbf{v}_{ij}^{\{c,t\}} dt + \eta_{ij}^{\{t\}} \int_{\mathbf{v}_{ij}^{\{c,t\}}}^{\mathbf{v}_{ij}^{\{c,t\}}} d\mathbf{v}_{ij}^{\{c,t\}}, \quad (5.5.26)$$

onde $\mathbf{F}_{ij}^{\{t\}}$ e $\mathbf{v}_{ij}^{\{c,t\}}$ são as correspondentes força e velocidade relativa calculadas no instante $t - \Delta t$. Por sua vez, $\widetilde{\mathbf{F}}_{ij}^{\{t\}}$ é o valor da força tangencial, calculada no t , mas sob a hipótese de não-deslizamento durante o período considerado. A integral do lado esquerdo e a segunda integral do lado direito da equação acima têm solução direta. Por outro lado, a solução exata da primeira integral do lado direito exigiria o conhecimento do perfil de $\mathbf{v}_{ij}^{\{c,t\}}$ ao longo do intervalo. Em lugar disto, opta-se pela solução numérica

de tal integral através do método do trapézio, de modo que apenas os valores de $\mathbf{v}_{ij}^{\{c,t\}}$ nos instantes inicial e final do intervalo são necessários. Desta maneira, obtém-se

$$\tilde{\mathbf{F}}_{ij}^{\{t\}} = \mathbf{F}_{ij}^{\{t\}} + k_{ij}^{\{t\}} \frac{(\mathbf{v}_{ij}^{\{c,t\}} + \mathbf{v}_{ij}^{\{c,t\}}) \Delta t}{2} + \eta_{ij}^{\{t\}} (\mathbf{v}_{ij}^{\{c,t\}} - \mathbf{v}_{ij}^{\{c,t\}}), \quad (5.5.27)$$

Um pequeno rearranjo da expressão acima leva a

$$\tilde{\mathbf{F}}_{ij}^{\{t\}} = \mathbf{F}_{ij}^{\{t\}} + (k_{ij}^{\{t\}} \Delta t / 2 + \eta_{ij}^{\{t\}}) \mathbf{v}_{ij}^{\{c,t\}} + (k_{ij}^{\{t\}} \Delta t / 2 - \eta_{ij}^{\{t\}}) \mathbf{v}_{ij}^{\{c,t\}}. \quad (5.5.28)$$

Se o módulo de $\tilde{\mathbf{F}}_{ij}^{\{t\}}$ ficar aquém do limite imposto pela Lei de Coulomb, então mantém-se a hipótese do não-deslizamento. Senão, conclui-se que as partículas, de fato, iniciaram um deslizamento em algum ponto do intervalo em questão. Diante disto, postula-se que o valor correto de $\mathbf{F}_{ij}^{\{t\}}$, no instante t , corresponde a um vetor com direção e sentido iguais aos de $\tilde{\mathbf{F}}_{ij}^{\{t\}}$, mas com módulo igual a $\mu_{ij} \|\mathbf{F}_{ij}^{\{n\}}\|$. Matematicamente, traduz-se este procedimento por meio da expressão

$$\mathbf{F}_{ij}^{\{t\}} = \min \left[1, \frac{\mu_{ij} \|\mathbf{F}_{ij}^{\{n\}}\|}{\|\tilde{\mathbf{F}}_{ij}^{\{t\}}\|} \right] \tilde{\mathbf{F}}_{ij}^{\{t\}}, \quad (5.5.29)$$

onde a função $\min[\circ]$ retorna o seu argumento de menor valor.

Assim, tem-se um algoritmo para o cálculo da força tangencial baseado em subseqüentes incrementos, efetuados na medida em que se integram as equações do movimento. Vale enfatizar que tal procedimento é válido somente enquanto houver interpenetração entre as partículas “i” e “j” e, portanto, ele tem início no momento em que se principia um contato entre elas ($t_{ij}^{\{0\}}$), quando se assume que o deslocamento tangencial é nulo ($\delta_{ij}^{\{t\}} = \mathbf{0}$). Com respeito à força tangencial no mesmo instante, a ser utilizada no primeiro passo do procedimento, o uso direto da Equação (5.5.20) demonstra que, tal como no caso da direção normal, ela não é nula, mas dada por

$$\mathbf{F}_{ij}^{\{t\}}(t_{ij}^{\{0\}}) = \eta_{ij}^{\{t\}} \mathbf{v}_{ij}^{\{c,t\}}(t_{ij}^{\{0\}}). \quad (5.5.30)$$

Se Δt for equivalente ao intervalo de integração das equações do movimento, tem-se um procedimento para cálculo seqüencial da força tangencial, bastando que sejam armazenados, em cada passo de integração, os valores de $\mathbf{F}_{ij}^{\{t\}}$ e $\mathbf{v}_{ij}^{\{c,t\}}$, visando a sua utilização no passo posterior. Para finalizar, deve-se dirigir a atenção a um fato de grande importância, mas que foi negligenciado até este ponto. Trata-se da dificuldade, mencionada previamente, imposta pela contínua mudança da orientação do plano de contato entre duas partículas. Conseqüentemente, se esta orientação se alterar entre os instantes $t - \Delta t$ e t , implícitos na Equação (5.5.28), os vetores $\mathbf{F}_{ij}^{\{t\}}$ e $\mathbf{v}_{ij}^{\{c,t\}}$ não serão paralelos ao plano de contato correspondente ao instante t , resultando em um vetor $\tilde{\mathbf{F}}_{ij}^{\{t\}}$ que, de fato, não é tangencial ao contato. Todavia, como se presume a adoção de curtos intervalos de tempo, a mudança de orientação é tênue, de modo que os ângulos entre o plano e os vetores $\mathbf{F}_{ij}^{\{t\}}$ e $\mathbf{v}_{ij}^{\{c,t\}}$ devem ser pequenos. Diante disto, baseando-se em um algoritmo proposto por Walton (1993), substitui-se a Equação (5.5.28) por

$$\tilde{\mathbf{F}}_{ij}^{\{t\}} = \Omega_{ij} \mathbf{F}_{ij}^{\{t\}} + (k_{ij}^{\{t\}} \Delta t / 2 + \eta_{ij}^{\{t\}}) \mathbf{v}_{ij}^{\{c,t\}} + (k_{ij}^{\{t\}} \Delta t / 2 - \eta_{ij}^{\{t\}}) \Omega_{ij} \mathbf{v}_{ij}^{\{c,t\}}, \quad (5.5.31)$$

onde Ω_{ij} é uma transformação adimensional que, aplicada a um vetor \mathbf{P} , gera um outro de igual magnitude, mas com direção igual à de sua projeção no plano de contato, isto é,

$$\Omega_{ij} \mathbf{P} = \|\mathbf{P}\| \frac{\mathbf{P} - (\mathbf{P} \cdot \hat{\mathbf{n}}_{ij}) \hat{\mathbf{n}}_{ij}}{\|\mathbf{P} - (\mathbf{P} \cdot \hat{\mathbf{n}}_{ij}) \hat{\mathbf{n}}_{ij}\|}. \quad (5.5.32)$$

Com isto, garante-se que $\mathbf{F}_{ij}^{\{t\}}$ será sempre tangencial ao contato, como necessário.

5.5.3 – Digressão a Respeito de Modelos de Força de Interação

Diversos autores têm proposto modelos alternativos ao “mola-pistão”, visando transcrever de forma mais acurada a força normal de contato entre partículas. Um deles é diretamente baseado na Teoria de Hertz para o contato entre sólidos elásticos (Vu-Quoc e Zhang, 1999a), a qual sugere que $F_{ij}^{\{n\}}$ seja igual a $k_{ij}^{\{n\}}(\delta_{ij}^{\{n\}})^{3/2}$, onde $k_{ij}^{\{n\}}$ é uma constante que depende da geometria e das propriedades elásticas das partículas (módulos de Young e coeficientes de Poisson). Como tal modelo é conservativo, Tsuji *et al.* (1992) propuseram a adição de um termo dissipativo, $\alpha_{ij}(m_{ij}k_{ij}^{\{n\}})(\delta_{ij}^{\{n\}})^{1/4}v_{ij}^{\{c,n\}}$, heurísticamente deduzido de modo a resultar em coeficientes de restituição independentes de m_{ij} , $k_{ij}^{\{n\}}$, ou da velocidade de impacto, mas apenas da constante α_{ij} . Em tal modelo, a força é nula quando $\delta_{ij}^{\{n\}}=0$, mas o problema da troca de sinais durante a colisão permanece. Outros modelos levam em consideração a ocorrência de deformações plásticas. Walton e colaboradores, por exemplo, propuseram um modelo simples denominado *Partially-Latching-Spring*, no qual a dependência entre força e deslocamento normal é linear, mas com constantes de proporcionalidade distintas durante a aproximação ou o afastamento das partículas, o que representa uma espécie de histerese (Cf. Walton e Braun, 1986). Assim, a força depende apenas indiretamente de $v_{ij}^{\{c,n\}}$, através do seu sinal. Ademais, não se permite que a força de contato se torne atrativa antes da separação das partículas. Porém, como nos outros casos, o coeficiente de restituição não depende da velocidade de impacto, o que diverge de observações experimentais (Dong e Moys, 2003). De fato, a dissipação da energia depende do nível de deformação plástica sofrida pelo par, o que aumenta com a velocidade de impacto, ou seja, quanto maior for esta, menor será o coeficiente de restituição. Este comportamento é obtido a partir de um outro modelo, desenvolvido por Thornton (1997). Neste, durante a aproximação entre as partículas, a força segue o modelo de Hertz até atingir um valor crítico (que depende da geometria e das propriedades das partículas), quando se inicia uma deformação plástica e a força passa a crescer linearmente com $\delta_{ij}^{\{n\}}$. Durante o afastamento, segue-se novamente o modelo de Hertz, mas com uma constante diferente, resultante do aumento irreversível no raio de curvatura do contato entre as partículas. Por fim, cita-se um modelo “elasto-plástico” mais recente, desenvolvido por Vu-Quoc e colaboradores (Vu-Quoc e Zhang, 1999a; Vu-Quoc *et al.*, 2000). Tal modelo é similar ao de Thornton (1997) em relação à adoção

da Teoria de Hertz para deformações elásticas e ao aumento irreversível do raio de curvatura. Entretanto, a modelagem de deformações plásticas se baseia em uma decomposição da área de contato em uma parte “elástica” e uma parte “plástica”. Tal modelo se mostrou mais acurado que o de Thornton (1997) em testes realizados a partir de análises de elementos finitos de esferas elasto-plásticas (Vu-Quoc e Zhang, 1999a).

Há também um esforço de pesquisadores no sentido de modelar de forma mais precisa as forças de contato na direção tangencial. Os modelos desenvolvidos têm como base a Teoria de Mindlin e Deresiewicz (1953) para a força elástica friccional entre duas esferas. Em geral, buscam-se simplificações desta teoria, já que ela é demasiadamente intrincada para ser utilizada no DEM. Como exemplo, citam-se os trabalhos de Walton e Braun (1986) e de Vu-Quoc e Zhang (1999b). O modelo proposto por estes últimos foi estendido mais tarde (Vu-Quoc *et al.*, 2001) para considerar a possibilidade de deformações plásticas na direção tangencial, de forma semelhante àquela do seu modelo para a força normal.

Para finalizar esta seção, cabe mencionar que, além de forças de compressão e de atrito, é possível acrescentar na formulação do DEM forças de adesão entre as partículas. Isto é necessário, por exemplo, quando se pretende estudar sistemas constituídos por partículas molhadas, ou seja, com líquidos aderidos em suas superfícies. Desta forma, quando duas partículas se aproximam, forma-se uma ponte líquida entre elas que as une através de forças de capilaridade. Vários autores, tais como Lian *et al.* (1998), Mikami *et al.* (1998) e Hsiau e Yang (2003), acrescentaram à formulação do DEM modelos para tais forças, que consistem em soluções aproximadas da Equação de Laplace-Young.

5.6 – Forças de Interação com Obstáculos

Além das forças de interação entre as partículas, necessita-se de modelos para as forças exercidas sobre elas por possíveis obstáculos presentes no sistema. Como não se

teve acesso, na literatura, a detalhes deste tipo de cálculo, nem mesmo para sistemas bidimensionais, propõe-se uma metodologia independente. De fato, aplicam-se os mesmos modelos utilizados para interações partícula-partícula, mas com fórmulas específicas para cálculo das grandezas que dependem da geometria dos obstáculos. Por simplicidade, adotam-se, para representar grandezas referentes a obstáculos ou a pares “partícula-obstáculo”, os mesmos símbolos utilizados para grandezas análogas relativas a partículas ou a pares de partículas, mas assinalando-se cada um deles com um apóstrofo, de forma a se evitar possíveis ambigüidades. Desta forma, a força que um obstáculo “k” exerce sobre uma partícula “i” é dada por

$$\mathbf{F}'_{ik} = \mathbf{F}^{(n)}_{ik} + \min \left[1, \frac{u'_{ik} \|\mathbf{F}^{(n)}_{ik}\|}{\|\tilde{\mathbf{F}}^{(t)}_{ik}\|} \right] \tilde{\mathbf{F}}^{(t)}_{ik}, \quad (5.6.1)$$

$$\text{onde } \mathbf{F}^{(n)}_{ik} = (-k^{(n)}_{ik} \delta^{(n)}_{ik} + \eta^{(n)}_{ik} v^{(c,n)}_{ik}) \hat{\mathbf{n}}'_{ik} \quad \text{e} \quad (5.6.2)$$

$$\tilde{\mathbf{F}}^{(t)}_{ik} = \Omega^{(t)}_{ik} \mathbf{F}^{(t)}_{ik} + (k^{(t)}_{ik} \Delta t / 2 + \eta^{(t)}_{ik}) \mathbf{v}^{(c,t)}_{ik} + (k^{(t)}_{ik} \Delta t / 2 - \eta^{(t)}_{ik}) \Omega^{(t)}_{ik} \mathbf{v}^{(c,t)}_{ik}. \quad (5.6.3)$$

Pode-se obter os parâmetros $\eta^{(n)}_{ik}$ e $\eta^{(t)}_{ik}$ a partir de coeficientes de restituição, como no caso dos seus análogos para pares partícula-partícula, o que é efetuado através de equações similares à (5.5.18). Porém, ressalta-se que a descrição do movimento de um obstáculo, que é prescrito em vez de calculado, prescinde do conhecimento de sua massa. Ademais, as forças que as partículas exercem sobre ele não desempenham qualquer influência sobre a sua trajetória, tal como se ele fosse um corpo de massa infinita. Portanto, a massa reduzida de cada par “ik” [Equação (5.5.16)], necessária para o cálculo das constantes de amortecimento normal e tangencial em função dos respectivos coeficientes de restituição, pode ser obtida adotando-se tal limite, ou seja,

$$m'_{ik} = \lim_{m_k \rightarrow \infty} \frac{m_i m'_k}{m_i + m'_k} = m_i. \quad (5.6.4)$$

As demais grandezas presentes nas Equações (5.6.1) a (5.6.3), ou seja, $\delta^{(n)}_{ik}$, $\hat{\mathbf{n}}'_{ik}$, $v^{(c,n)}_{ik}$ e $v^{(c,t)}_{ik}$, dependem da geometria e da cinemática do par “ik”. Vale observar que, em muitas das vezes, não é necessário tratar um obstáculo, matematicamente, como um

corpo sólido. Neste trabalho, são consideradas como obstáculos apenas superfícies planas ou cônicas (a serem detalhadas adiante), sendo que um conjunto delas pode ser usado para reproduzir o contorno de um objeto sólido. Cada obstáculo “k” é representado por um número de parâmetros geométricos fixos e por três vetores dependentes do tempo, $\mathbf{r}_k'(t)$, $\mathbf{v}_k'(t)$ e $\boldsymbol{\omega}_k'(t)$, que caracterizam o seu movimento. Respectivamente, tais vetores representam a posição de um ponto de referência escolhido (que pode, ou não, pertencer ao obstáculo), a velocidade de deslocamento de tal ponto e a velocidade angular de rotação do obstáculo em torno dele. Uma partícula “i” e um obstáculo “k” estarão em contato (interpenetração) se qualquer dos pontos materiais deste estiver situado no interior daquela ou, em outras palavras, se

$$\|\mathbf{r}_k^{(c,i)} - \mathbf{r}_i\| \leq R_i, \quad (5.6.5)$$

onde $\mathbf{r}_k^{(c,i)}$ é a posição do ponto material de “k” mais próximo do centro de “i”. Um exemplo de contato é mostrado na Figura 5.6.1, onde uma pequena parte de um obstáculo é representada por uma linha reta sólida com extremidades tracejadas. A partir da mesma figura, verifica-se que, se $\mathbf{r}_k^{(c,i)}$ for definido como a posição do ponto de contato de “k” com “i”, o deslocamento $\delta_{ik}^{(n)}$ e o vetor unitário $\hat{\mathbf{n}}_{ik}'$ podem ser diretamente calculados por

$$\delta_{ik}^{(n)} = R_i - \|\mathbf{r}_k^{(c,i)} - \mathbf{r}_i\| \quad \text{e} \quad (5.6.6)$$

$$\hat{\mathbf{n}}_{ik}' = \frac{\mathbf{r}_k^{(c,i)} - \mathbf{r}_i}{\|\mathbf{r}_k^{(c,i)} - \mathbf{r}_i\|}. \quad (5.6.7)$$

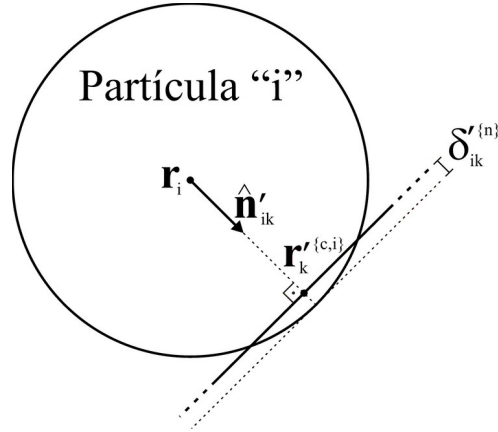


Figura 5.6.1 – Ponto de contato na interação entre partícula e obstáculo.

De acordo com a Equação (5.2.3), calcula-se a velocidade relativa entre os pontos de contato de “i” e “k” por meio de

$$\mathbf{v}_{ik}^{(c)} = (\mathbf{v}'_k + \boldsymbol{\omega}'_k \times \mathbf{q}'_{ki}) - (\mathbf{v}'_i + \boldsymbol{\omega}'_i \times \mathbf{q}'_{ik}) = \mathbf{v}'_k + \boldsymbol{\omega}'_k \times \mathbf{q}'_{ki} - \boldsymbol{\omega}'_i \times \mathbf{q}'_{ik}, \quad (5.6.8)$$

onde $\mathbf{v}'_{ik} = \mathbf{v}'_k - \mathbf{v}'_i$, \mathbf{q}'_{ik} é o vetor que liga o centro de “i” ao seu ponto de contato com “k”, dado pela Equação (5.3.8), e \mathbf{q}'_{ki} é o vetor que liga o ponto de referência de “k” ao seu contato com “i”, ou seja, $\mathbf{q}'_{ki} = \mathbf{r}_k^{(c,i)} - \mathbf{r}'_k$. Assim sendo, a equação acima se torna

$$\mathbf{v}_{ik}^{(c)} = \mathbf{v}'_k + \boldsymbol{\omega}'_k \times (\mathbf{r}_k^{(c,i)} - \mathbf{r}'_k) - \mathbf{R}_i \boldsymbol{\omega}'_i \times \hat{\mathbf{n}}'_{ik}. \quad (5.6.9)$$

Então, de $\mathbf{v}_{ik}^{(c)}$ são extraídas

$$\mathbf{v}_{ik}^{(c,n)} = \mathbf{v}_{ik}^{(c)} \cdot \hat{\mathbf{n}}'_{ij} \quad \text{e} \quad (5.6.10)$$

$$\mathbf{v}_{ik}^{(c,t)} = \mathbf{v}_{ik}^{(c)} - \mathbf{v}_{ik}^{(c,n)} \hat{\mathbf{n}}'_{ik}. \quad (5.6.11)$$

Portanto, demonstra-se que o conhecimento de $\mathbf{r}_k^{(c,i)}$ é suficiente para que se possa efetuar o cálculo de todas as variáveis necessárias à obtenção das forças de contato, o que traduz a dependência entre tais forças e a geometria do obstáculo “k” no mero cálculo de $\mathbf{r}_k^{(c,i)}$. A seguir, descrevem-se os parâmetros geométricos e os procedimentos

para cálculo de $\mathbf{r}_k^{(c,i)}$ correspondentes aos dois tipos de obstáculo considerados neste trabalho.

5.6.1 – Obstáculos Planos

Um obstáculo plano é uma superfície retangular que pode assumir qualquer posição e qualquer orientação no espaço cartesiano tridimensional. Para se caracterizar um obstáculo plano “k”, além dos parâmetros cinemáticos $\mathbf{r}'_k(t)$, $\mathbf{v}'_k(t)$ e $\boldsymbol{\omega}'_k(t)$, utilizam-se quatro parâmetros geométricos, sendo dois vetores unitários e ortogonais entre si, $\hat{\mathbf{u}}_k(t)$ e $\hat{\mathbf{w}}_k(t)$, que denotam as direções principais do obstáculo, e dois escalares constantes e positivos, $L_k^{\{u\}}$ e $L_k^{\{w\}}$, que são os seus comprimentos nas direções de $\hat{\mathbf{u}}_k$ e $\hat{\mathbf{w}}_k$, respectivamente. Explica-se que estes símbolos não possuem apóstrofos porque não há análogos a eles entre os símbolos referentes a partículas e, por isto, não existe risco de ambigüidade. Escolhe-se como ponto de referência de “k”, ou seja, aquele que no instante t se encontra na posição \mathbf{r}'_k , o seu ponto central. Toda esta caracterização pode ser melhor compreendida por intermédio da Figura 5.6.2.

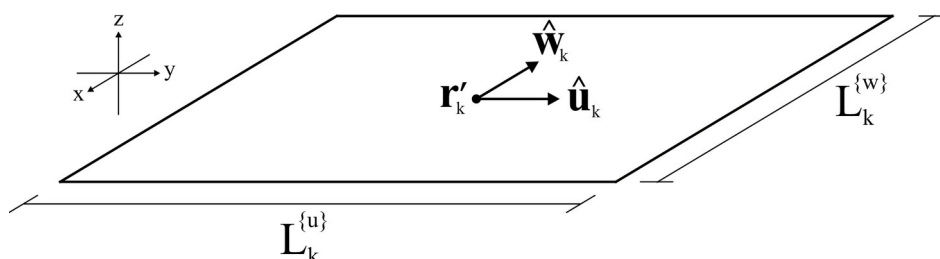


Figura 5.6.2 – Geometria de um obstáculo plano.

Dados uma partícula “i” e um obstáculo plano “k”, é possível se obter, analiticamente, expressões para cálculo de $\mathbf{r}_k^{(c,i)}$, o que é feito através da solução de um problema de minimização (já que se trata do ponto de “k” cuja distância até o centro de “i” é mínima). Porém, tais expressões serão obtidas aqui de forma indutiva, recorrendo-se à geometria e à álgebra linear. Para isto, a Figura 5.6.3 será de grande ajuda.

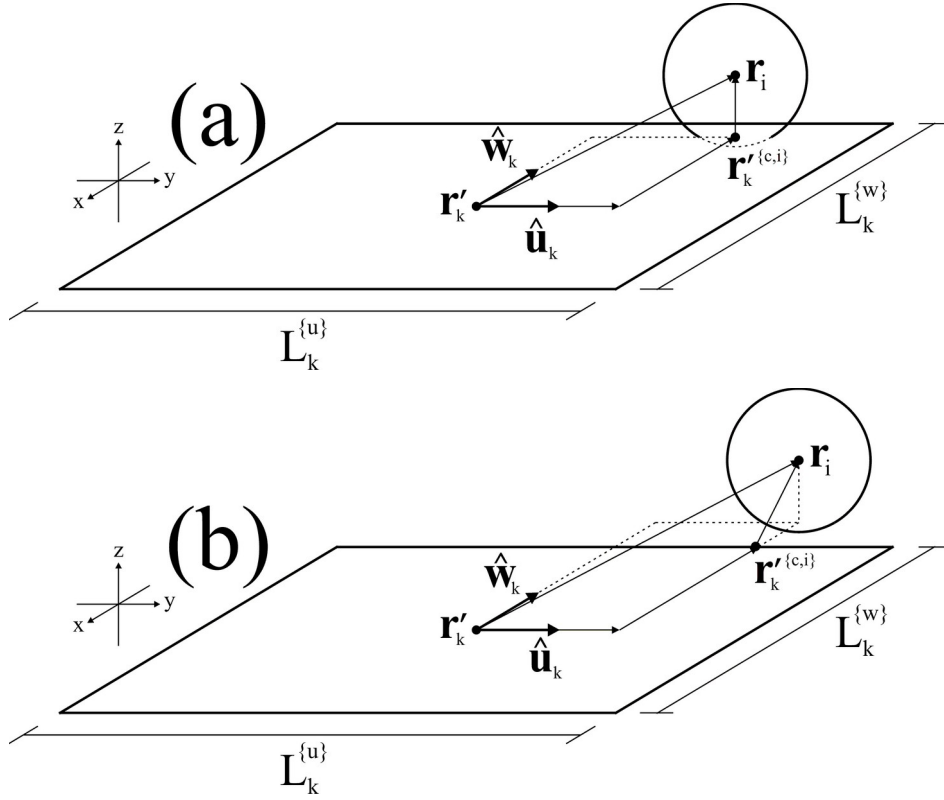


Figura 5.6.3 – Esquemas para cálculo de $\mathbf{r}_k^{(c,i)}$ em obstáculos planos.

Primeiro, denomina-se de \mathbf{r}'_{ki} a posição relativa entre “i” e “k”, isto é,

$$\mathbf{r}'_{ki} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_k. \quad (5.6.12)$$

Então, define-se uma transformação linear Π_k que, aplicada a um vetor qualquer, retorna a sua projeção no plano definido pelos vetores $\hat{\mathbf{u}}_k$ e $\hat{\mathbf{w}}_k$. Portanto, tem-se que

$$\Pi_k \mathbf{r}'_{ki} = (\mathbf{r}'_{ki} \cdot \hat{\mathbf{u}}_k) \hat{\mathbf{u}}_k + (\mathbf{r}'_{ki} \cdot \hat{\mathbf{w}}_k) \hat{\mathbf{w}}_k. \quad (5.6.13)$$

Se tal projeção recair integralmente sobre o obstáculo “k”, como no exemplo da Figura 5.6.3(a), tem-se que ela própria será igual ao vetor que liga o ponto central de “k” ao seu ponto de contato com a partícula “i”, ou seja, igual a $\mathbf{r}_k^{(c,i)} - \mathbf{r}_k$. Isto ocorrerá se, simultaneamente,

$$- L_k^{\{u\}} / 2 \leq \mathbf{r}'_{ki} \cdot \hat{\mathbf{u}}_k \leq L_k^{\{u\}} / 2 \text{ e} \quad (5.6.14)$$

$$- L_k^{\{w\}} / 2 \leq \mathbf{r}'_{ki} \cdot \hat{\mathbf{w}}_k \leq L_k^{\{w\}} / 2. \quad (5.6.15)$$

Portanto, se as condições acima forem satisfeitas, o valor de $\mathbf{r}_k^{\{c,i\}}$ será dado por

$$\mathbf{r}_k^{\{c,i\}} = \mathbf{r}'_k + \Pi_k \mathbf{r}'_{ki} = \mathbf{r}'_k + (\mathbf{r}'_{ki} \cdot \hat{\mathbf{u}}_k) \hat{\mathbf{u}}_k + (\mathbf{r}'_{ki} \cdot \hat{\mathbf{w}}_k) \hat{\mathbf{w}}_k. \quad (5.6.16)$$

Se, contudo, a referida projeção não incidir totalmente sobre o obstáculo, conforme se observa na Figura 5.6.3(b), o ponto mais próximo de \mathbf{r}_i será um dos pontos do contorno de “k”. No exemplo em questão, a componente de \mathbf{r}'_{ki} na direção de $\hat{\mathbf{w}}_k$, $\mathbf{r}'_{ki} \cdot \hat{\mathbf{w}}_k$, é maior que $L_k^{\{w\}} / 2$, deixando assim de atender à condição (5.6.15). Neste caso, uma análise da Figura 5.6.3(b) mostra que, para a obtenção de $\mathbf{r}_k^{\{c,i\}}$, o termo $\mathbf{r}'_{ki} \cdot \hat{\mathbf{w}}_k$ da Equação (5.6.16) pode ser substituído por $L_k^{\{w\}} / 2$, ou seja,

$$\mathbf{r}_k^{\{c,i\}} = \mathbf{r}'_k + (\mathbf{r}'_{ki} \cdot \hat{\mathbf{u}}_k) \hat{\mathbf{u}}_k + \frac{L_k^{\{w\}}}{2} \hat{\mathbf{w}}_k. \quad (5.6.17)$$

Se, por exemplo, $\mathbf{r}'_{ki} \cdot \hat{\mathbf{w}}_k$ fosse menor que $- L_k^{\{w\}} / 2$, a substituição teria sido feita por este último. Raciocínio análogo deve ser usado para os casos em que o termo $\mathbf{r}'_{ki} \cdot \hat{\mathbf{u}}_k$ não satisfizer à condição (5.6.14). Generalizando-se, tem-se que

$$\mathbf{r}_k^{\{c,i\}} = \mathbf{r}'_k + \lambda_{ik}^{\{u\}} \hat{\mathbf{u}}_k + \lambda_{ik}^{\{w\}} \hat{\mathbf{w}}_k, \quad (5.6.18)$$

$$\text{onde } \lambda_{ik}^{\{u\}} = \max \left[- L_k^{\{u\}} / 2, \min \left[\mathbf{r}'_{ki} \cdot \hat{\mathbf{u}}_k, L_k^{\{u\}} / 2 \right] \right] \text{ e} \quad (5.6.19)$$

$$\lambda_{ik}^{\{w\}} = \max \left[- L_k^{\{w\}} / 2, \min \left[\mathbf{r}'_{ki} \cdot \hat{\mathbf{w}}_k, L_k^{\{w\}} / 2 \right] \right]. \quad (5.6.20)$$

Nas equações acima, a função $\max[\circ]$ retorna o maior de seus argumentos.

5.6.2 – Obstáculos Cônicos

A forma geométrica de um obstáculo cônico “k” pode ser apreciada na Figura 5.6.4. Trata-se da superfície lateral de um tronco de cone de altura L_k , cujas extremidades têm raios $R_k^{\{a\}}$ e $R_k^{\{p\}}$. Toma-se como ponto de referência de “k” aquele que pertence ao seu eixo central e que dista igualmente das duas extremidades. Admite-se que, em determinado instante t , tal ponto esteja situado em $\mathbf{r}'_k(t)$ e se desloque a uma velocidade igual a $\mathbf{v}'_k(t)$. No mesmo instante, o eixo central do obstáculo tem direção igual à de um vetor unitário $\hat{\mathbf{u}}_k(t)$ e, além disto, todos os seus pontos realizam uma rotação em torno de \mathbf{r}'_k com velocidade angular $\boldsymbol{\omega}'_k(t)$. Em relação ao ponto \mathbf{r}'_k , a extremidade de raio $R_k^{\{a\}}$ é chamada de “anterior”, pois se encontra em posição oposta ao sentido de $\hat{\mathbf{u}}_k$. Por outro lado, a extremidade de raio $R_k^{\{p\}}$ é dita “posterior”.

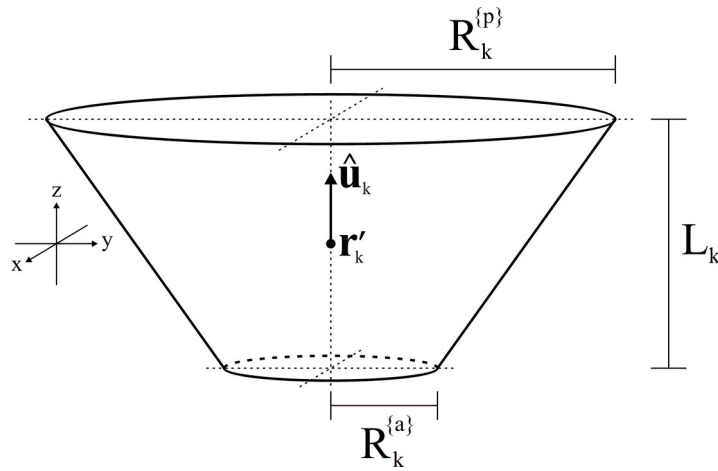


Figura 5.6.4 – Geometria de um obstáculo cônico.

A escolha deste tipo de obstáculo se deve à sua flexibilidade, já que outras formas geométricas, além da apresentada na Figura 5.6.4, podem ser geradas através de tratamento apropriado dos parâmetros L_k , $R_k^{\{a\}}$ e $R_k^{\{p\}}$. Por exemplo, fazendo-se $R_k^{\{a\}} = 0$ ou $R_k^{\{p\}} = 0$, tem-se a superfície lateral de um cone. Tomando-se $R_k^{\{p\}} = R_k^{\{a\}}$,

obtem-se uma superfície cilíndrica. Se, por outro lado, se fizer $L_k = 0$, pode-se formar um anel, se $R_k^{\{a\}}$ e $R_k^{\{p\}}$ forem ambos positivos, ou um disco, se um deles for nulo.

Também aqui é realizada uma análise vetorial para se obter, indutivamente, a posição do ponto de um obstáculo cônico “k” que possui a menor distância em relação ao centro de uma partícula “i”. Para isto, assim como foi feito no caso de obstáculos planos, parte-se do vetor \mathbf{r}'_{ki} que, do ponto de referência de “k”, aponta para o centro de “i” [Equação (5.6.12)]. Se \mathbf{r}'_{ki} e $\hat{\mathbf{u}}_k$ forem linearmente independentes (o que ocorre quando \mathbf{r}_i não incide sobre o eixo central de “k”), o ponto procurado, $\mathbf{r}_k^{\{c,i\}}$, estará situado sobre o plano definido por eles. Isto pode ser inferido por meio da Figura 5.6.5, que mostra um corte realizado em tal plano. Como, neste caso, o obstáculo “k” equivale a uma superfície obtida pela revolução das linhas retas mais espessas em torno do eixo principal, conclui-se que qualquer ponto pertencente a tal superfície e situado fora do plano da figura estará a uma distância de \mathbf{r}_i maior que a do ponto assinalado como $\mathbf{r}_k^{\{c,i\}}$. Portanto, se a independência linear entre \mathbf{r}'_{ki} e $\hat{\mathbf{u}}_k$ for satisfeita, a análise pode se restringir ao plano definido por eles.

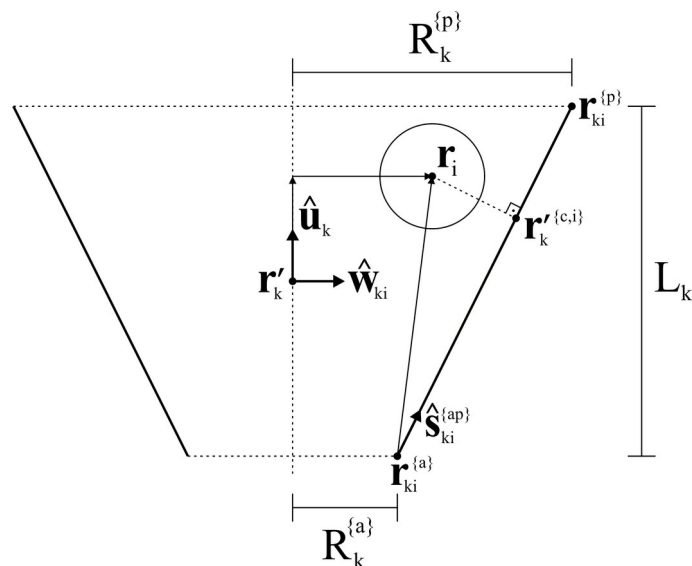


Figura 5.6.5 – Esquema para cálculo de $\mathbf{r}_k^{\{c,i\}}$ em obstáculos cônicos.

De modo a se obter uma base de vetores unitários e ortogonais para o referido plano, aplica-se o processo de ortonormalização de Gram-Schmidt que, por $\hat{\mathbf{u}}_k$ já ser unitário, pode ser resumido ao seguinte passo:

$$\hat{\mathbf{w}}_{ki} = \frac{\boldsymbol{\alpha}_{ik}}{\|\boldsymbol{\alpha}_{ik}\|}, \quad (5.6.21)$$

$$\text{onde } \boldsymbol{\alpha}_{ik} = \mathbf{r}'_{ki} - (\mathbf{r}'_{ki} \cdot \hat{\mathbf{u}}_k) \hat{\mathbf{u}}_k. \quad (5.6.22)$$

Se \mathbf{r}'_{ki} e $\hat{\mathbf{u}}_k$ forem colineares, tem-se que $\mathbf{r}'_{ki} = (\mathbf{r}'_{ki} \cdot \hat{\mathbf{u}}_k) \hat{\mathbf{u}}_k$, e a equação acima se torna imprópria. Este tipo de situação será analisado separadamente, *a posteriori*. De acordo com a sua definição, $\hat{\mathbf{w}}_{ki}$ aponta do eixo do obstáculo “k” para o seu corte mais próximo do centro da partícula “i”, tal como mostrado na Figura 5.6.5. Assim, os extremos do segmento no qual se encontra \mathbf{r}'_{ki} , chamados de $\mathbf{r}_{ki}^{\{a\}}$ e $\mathbf{r}_{ki}^{\{p\}}$, podem ser obtidos traçando-se caminhos com origem no ponto \mathbf{r}'_k , ou seja,

$$\mathbf{r}_{ki}^{\{a\}} = \mathbf{r}'_k - \frac{L_k}{2} \hat{\mathbf{u}}_k + R_k^{\{a\}} \hat{\mathbf{w}}_{ik} \quad (5.6.23)$$

$$\mathbf{r}_{ki}^{\{p\}} = \mathbf{r}'_k + \frac{L_k}{2} \hat{\mathbf{u}}_k + R_k^{\{p\}} \hat{\mathbf{w}}_{ik}. \quad (5.6.24)$$

Define-se, então, como $\mathbf{r}_{ki}^{\{ap\}}$, o vetor aponta de $\mathbf{r}_{ki}^{\{a\}}$ a $\mathbf{r}_{ki}^{\{p\}}$, ou seja,

$$\mathbf{r}_{ki}^{\{ap\}} = \mathbf{r}_{ki}^{\{p\}} - \mathbf{r}_{ki}^{\{a\}} = L_k \hat{\mathbf{u}}_k + (R_k^{\{p\}} - R_k^{\{a\}}) \hat{\mathbf{w}}_{ik}. \quad (5.6.25)$$

Sabendo-se que o quadrado do módulo de $\mathbf{r}_{ki}^{\{ap\}}$ é igual a $\mathbf{r}_{ki}^{\{ap\}} \cdot \mathbf{r}_{ki}^{\{ap\}}$, obtém-se

$$\|\mathbf{r}_{ki}^{\{ap\}}\|^2 = L_k^2 \hat{\mathbf{u}}_k \cdot \hat{\mathbf{u}}_k + 2L_k (R_k^{\{p\}} - R_k^{\{a\}}) \hat{\mathbf{u}}_k \cdot \hat{\mathbf{w}}_{ik} + (R_k^{\{p\}} - R_k^{\{a\}})^2 \hat{\mathbf{w}}_{ik} \cdot \hat{\mathbf{w}}_{ik}. \quad (5.6.26)$$

Como $\hat{\mathbf{u}}_k$ e $\hat{\mathbf{w}}_{ik}$ são ambos unitários e ortogonais entre si, tem que $\hat{\mathbf{u}}_k \cdot \hat{\mathbf{u}}_k = 1$, $\hat{\mathbf{w}}_{ik} \cdot \hat{\mathbf{w}}_{ik} = 1$ e $\hat{\mathbf{u}}_k \cdot \hat{\mathbf{w}}_{ik} = 0$. Logo, o módulo de $\mathbf{r}_{ki}^{\{ap\}}$ é dado por

$$\|\mathbf{r}_{ki}^{\{ap\}}\| = \sqrt{L_k^2 + (R_k^{\{p\}} - R_k^{\{a\}})^2}. \quad (5.6.27)$$

Isto mostra que o comprimento de $\mathbf{r}_{ki}^{\{ap\}}$ é igual à hipotenusa de um triângulo retângulo cujos catetos são L_k e $R_k^{\{p\}} - R_k^{\{a\}}$. No exemplo da Figura 5.6.5, o vetor que liga a extremidade $\mathbf{r}_{ki}^{\{a\}}$ ao ponto $\mathbf{r}_k^{\{c,i\}}$ é igual à projeção, sobre a reta definida por $\mathbf{r}_{ki}^{\{ap\}}$, do vetor que liga aquela extremidade ao centro da partícula “i”, ou seja,

$$\mathbf{r}_k^{\{c,i\}} - \mathbf{r}_{ki}^{\{a\}} = [(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{ki}^{\{a\}}) \cdot \hat{\mathbf{s}}_{ki}^{\{ap\}}] \hat{\mathbf{s}}_{ki}^{\{ap\}}, \quad (5.6.28)$$

$$\text{onde } \hat{\mathbf{s}}_{ki}^{\{ap\}} = \frac{\mathbf{r}_{ki}^{\{ap\}}}{\|\mathbf{r}_{ki}^{\{ap\}}\|} = \frac{L_k \hat{\mathbf{u}}_k + (R_k^{\{p\}} - R_k^{\{a\}}) \hat{\mathbf{w}}_{ik}}{\sqrt{L_k^2 + (R_k^{\{p\}} - R_k^{\{a\}})^2}}. \quad (5.6.29)$$

O resultado acima será verdadeiro sempre que a referida projeção recair integralmente sobre a superfície do obstáculo. Se, no entanto, isto não ocorrer, o ponto $\mathbf{r}_k^{\{c,i\}}$ será um dos extremos fornecidos pelas Equações (5.6.23) e (5.6.24). Diante disto, pode-se escrever, de forma geral, que

$$\mathbf{r}_k^{\{c,i\}} = \mathbf{r}_{ki}^{\{a\}} + \lambda_{ki} \hat{\mathbf{s}}_{ki}^{\{ap\}}, \quad (5.6.30)$$

$$\text{onde } \lambda_{ki} = \max \left[0, \min \left[(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{ki}^{\{a\}}) \cdot \hat{\mathbf{s}}_{ki}^{\{ap\}}, \|\mathbf{r}_{ki}^{\{ap\}}\| \right] \right]. \quad (5.6.31)$$

O resultado acima é válido tanto para partículas localizadas no interior do obstáculo, como no exemplo da Figura 5.6.5, quanto para aquelas situadas no seu exterior. A única circunstância que invalida este resultado, como já se afirmou, é a colinearidade os vetores $\mathbf{r}_{ki}^{\{a\}}$ e $\hat{\mathbf{u}}_k$, o que ocorre quando o centro da partícula recai sobre o eixo principal do obstáculo. Neste caso, devido à simetria estabelecida, não há um único ponto da superfície que tenha distância mínima ao ponto \mathbf{r}_i , mas sim um lugar geométrico em forma de circunferência. Isto invalida os modelos de força adotados [Equações (5.6.1) a (5.6.3)], que pressupõem a existência de tal ponto. Entretanto, para efeito de cálculo, pode-se escolher, aleatoriamente, um dos pontos de

tal circunferência e nomeá-lo como $\mathbf{r}_k^{(c,i)}$, o que equivale a tomar como plano de análise qualquer um que contenha o eixo principal do obstáculo. Para isto, sugere-se gerar aleatoriamente um vetor linearmente independente de $\hat{\mathbf{u}}_k$ (Allen e Tildesley, 1987, p. 349) e, em seguida, inseri-lo na Equação (5.6.22), em lugar de \mathbf{r}_{ki}' . O restante do procedimento pode, então, ser executado normalmente.

5.7 – Solução das Equações do Movimento

Na grande maioria dos estudos realizados com o DEM, empregam-se métodos numéricos explícitos para a integração das equações do movimento. Os principais são apresentados na Tabela 5.7.1, juntamente com referências a artigos recentes que descrevem o uso de cada um.

Tabela 5.7.1 - Esquemas numéricos explícitos empregados no DEM.

Id.	Esquema	Referências recentes
(A)	$\begin{cases} (\mathbf{v}_i)_{t+\Delta t/2} = (\mathbf{v}_i)_{t-\Delta t/2} \\ (\boldsymbol{\omega}_i)_{t+\Delta t/2} = (\boldsymbol{\omega}_i)_{t-\Delta t/2} \\ (\mathbf{r}_i)_{t+\Delta t} = (\mathbf{r}_i)_t + (\mathbf{v}_i)_{t+\Delta t/2} \Delta t \end{cases}$	<p>Cheng <i>et al.</i> (2000)</p> <p>Yang e Hsiau (2001)</p> <p>Mishra (2003)</p>
(B)	$\begin{cases} (\mathbf{v}_i)_{t+\Delta t} = (\mathbf{v}_i)_t + (\mathbf{a}_i)_t \Delta t \\ (\boldsymbol{\omega}_i)_{t+\Delta t} = (\boldsymbol{\omega}_i)_t + (\boldsymbol{\alpha}_i)_t \Delta t \\ (\mathbf{r}_i)_{t+\Delta t} = (\mathbf{r}_i)_t + (\mathbf{v}_i)_t \Delta t \end{cases}$	<p>Lian <i>et al.</i> (1998)</p> <p>Maeda <i>et al.</i> (2003)</p>
(C)	$\begin{cases} (\mathbf{r}_i)_{t+\Delta t} = (\mathbf{r}_i)_t + (\mathbf{v}_i)_t \Delta t + (1/2)(\mathbf{a}_i)_t \Delta t^2 \\ (\mathbf{v}_i)_{t+\Delta t} = (\mathbf{v}_i)_t + (\mathbf{a}_i)_t \Delta t \\ (\boldsymbol{\omega}_i)_{t+\Delta t} = (\boldsymbol{\omega}_i)_t + (\boldsymbol{\alpha}_i)_t \Delta t \end{cases}$	Asmar <i>et al.</i> (2002)

No trabalho original (Cundall e Strack, 1979), utilizou-se o esquema identificado na tabela como (A), no qual as posições e as velocidades são avaliadas em instantes intercalados. Este tipo de método é comumente referido como *leap-frog* (nome, em inglês, da brincadeira infantil conhecida no Brasil como “pular carniça”). Nos demais métodos, as posições e as velocidades são avaliadas no mesmo instante. A principal razão do uso de métodos explícitos é o fato de que, a cada passo de integração, as forças sobre as partículas são calculadas uma única vez. No entanto, tais métodos apresentam

instabilidade na solução se o intervalo de integração (Δt) exceder um certo valor crítico. Mais do que isto, geralmente se exige, para se ter uma precisão aceitável, a adoção de intervalos muito curtos, da ordem de 40 a 50 vezes menor que a duração dos contatos entre partículas colidentes (Walton e Braun, 1986; Vu-Quoc e Zhang, 1999b), o que compromete a eficiência de uma simulação. Diante disto, com o intuito de tornar os contatos mais longos, diversos autores se valem do emprego de valores baixos para os parâmetros $k_{ij}^{\{n\}}$ [Cf. Equação (5.5.15)], cujo efeito colateral é permitir interpenetrações excessivamente profundas entre as partículas.

A utilização de métodos implícitos, naturalmente mais estáveis e precisos, é inviável, principalmente para sistemas com muitas partículas, pois exigiria a solução de complexos sistemas de equações algébricas não-lineares a cada passo de integração. Uma alternativa factível se constitui nos chamados métodos de predição e correção (Boyce e Diprima, 1998, p. 313). Neste caso, em cada passo de integração, executam-se dois ciclos de cálculo de forças, mas é possível que tal esforço adicional seja compensado pela possibilidade de empregar intervalos de integração mais longos, graças às maiores precisão e estabilidade em relação aos esquemas explícitos. Xu e Yu (1997) utilizaram um método classificado por eles como de predição e correção, mas uma análise das expressões empregadas leva à conclusão de que não há vantagem em se utilizar o referido método com um intervalo Δt ou, por exemplo, o Esquema (C) da Tabela 5.7.1 com um intervalo $\Delta t / 2$. Cleary e colaboradores (Cleary e Hoyer, 2000; Cleary e Sawley, 2002; Cleary *et al.* 2003) informam ter utilizado um método de predição e correção de segunda ordem, mas nenhum dentre os seus trabalhos aos quais se teve acesso contém detalhes a respeito. No presente trabalho, opta-se pela adoção de um método de predição e correção, o que é facilitado pelo modo como foram apresentados as equações de movimento e os modelos de força. Baseando-se no texto de Boyce e Diprima (1998, p. 313), elegeram-se as fórmulas de Adams-Bashforth e de Adams-Moulton, ambas de quarta ordem, para as etapas preditiva e corretiva, respectivamente. Isto significa que, para se efetuar um determinado passo de integração, os resultados obtidos nos três passos anteriores para todas as variáveis (no caso, \mathbf{r}_i , \mathbf{v}_i , $\boldsymbol{\omega}_i$, \mathbf{a}_i e $\boldsymbol{\alpha}_i$, para todo $i = 1, \dots, N_p$) devem estar disponíveis. Em termos computacionais, isto exige a alocação de maior quantidade de memória que no caso de

um método explícito ou de um método de predição e correção de menor ordem. Entretanto, a escolha teve como base o fato de ser o esforço computacional, e não a demanda de memória, o maior problema do DEM. Resumindo-se, o procedimento adotado consiste no seguinte. Dadas as posições e velocidades das partículas em um instante t , calculam-se todas as forças e torques sobre elas através dos modelos apresentados nas seções anteriores. Em seguida, calculam as acelerações translacionais e angulares de cada partícula através das Equações (5.3.11) e (5.3.12) e, então, estimam-se novas posições e velocidades, no instante $t + \Delta t$, através da fórmula de Adams-Bashforth, isto é,

$$i = 1, \dots, N_p \begin{cases} (\mathbf{r}_i^p)_{t+\Delta t} = (\mathbf{r}_i)_t + \frac{\Delta t}{24} [55(\mathbf{v}_i)_t + \\ (\mathbf{v}_i^p)_{t+\Delta t} = (\mathbf{v}_i)_t + \frac{\Delta t}{24} [55(\mathbf{a}_i)_t + \\ (\boldsymbol{\omega}_i^p)_{t+\Delta t} = (\boldsymbol{\omega}_i)_t + \frac{\Delta t}{24} [55(\boldsymbol{\alpha}_i)_t \end{cases} \quad (5.7.1)$$

onde $(\mathbf{r}_i^p)_{t+\Delta t}$, $(\mathbf{v}_i^p)_{t+\Delta t}$ e $(\boldsymbol{\omega}_i^p)_{t+\Delta t}$ são, nesta ordem, os valores preditos da posição, da velocidade translacional e da velocidade angular de uma partícula “i”. A partir dos mesmos, calculam-se novamente as forças e torques para chegar-se às acelerações translacional e angular preditas, denominadas de $(\mathbf{a}_i^p)_{t+\Delta t}$ e $(\boldsymbol{\alpha}_i^p)_{t+\Delta t}$. Então, efetua-se a correção por meio da fórmula de Adams-Moulton, ou seja,

$$i = 1, \dots, N_p \begin{cases} (\mathbf{r}_i)_{t+\Delta t} = (\mathbf{r}_i)_t + \frac{\Delta t}{24} [9(\mathbf{v}_i^p)_{t+\Delta t} + \\ (\mathbf{v}_i)_{t+\Delta t} = (\mathbf{v}_i)_t + \frac{\Delta t}{24} [9(\mathbf{a}_i^p)_{t+\Delta t} + \\ (\boldsymbol{\omega}_i)_{t+\Delta t} = (\boldsymbol{\omega}_i)_t + \frac{\Delta t}{24} [9(\boldsymbol{\alpha}_i^p)_{t+\Delta t} \end{cases} \quad (5.7.2)$$

Não se pode utilizar o procedimento descrito enquanto não se dispuser dos resultados de três passos anteriores. Devido a isto, o início de uma simulação, ou seja, o período entre $t=0$ e $t=3\Delta t$, é executado usando-se o Esquema (C) da Tabela 5.7.1, porém com intervalo de integração correspondente a uma pequena fração do Δt contido nas duas expressões acima, de modo a não comprometer a precisão da solução.

O esquema numérico apresentado exige a adoção de um intervalo de integração constante. Imagine-se, então, que duas partículas “i” e “j” estão em contato em um

instante t , após a realização de um passo de integração. Se tal contato já existia e os valores de $\dot{\mathbf{F}}_{ij}^{\{t\}}$ e $\dot{\mathbf{v}}_{ij}^{\{c,t\}}$ foram armazenados no final do passo anterior, a força tangencial pode ser diretamente calculada através das Equações (5.5.29) e (5.5.31), na qual Δt equivale ao intervalo de integração adotado. Se, por outro lado, o contato ainda não existia, não há valores armazenados e o tempo transcorrido desde o início do contato, simbolizado por $\Delta t_{ij}^{\{0\}}$, é menor que Δt . Neste caso, vale-se de algumas aproximações para o cálculo de $\mathbf{F}_{ij}^{\{t\}}$. Primeiramente, supõe-se que $\Delta t_{ij}^{\{0\}}$ seja conhecido e que, durante este intervalo, o valor de $\mathbf{v}_{ij}^{\{c,t\}}$ permaneceu constante, de modo que a força tangencial no início do contato era igual a $\eta_{ij}^{\{t\}} \mathbf{v}_{ij}^{\{c,t\}}$. Assim, efetuando-se as devidas substituições na Equação (5.5.31) ($\Delta t = \Delta t'$, $\dot{\mathbf{F}}_{ij}^{\{t\}} = \eta_{ij}^{\{t\}} \dot{\mathbf{v}}_{ij}^{\{c,t\}}$ e $\dot{\mathbf{v}}_{ij}^{\{c,t\}} = \mathbf{v}_{ij}^{\{c,t\}}$), chega-se a

$$\tilde{\mathbf{F}}_{ij}^{\{t\}} = (k_{ij}^{\{t\}} \Delta t_{ij}^{\{0\}} + \eta_{ij}^{\{t\}}) \mathbf{v}_{ij}^{\{c,t\}}. \quad (5.7.3)$$

No entanto, o valor de $\Delta t_{ij}^{\{0\}}$ é desconhecido. Para estimá-lo, assim como fizeram Xu e Yu (1997), presume-se que a velocidade relativa \mathbf{v}_{ij} também permaneceu fixa neste intervalo, de modo que, dada a atual posição relativa do par “ij” (\mathbf{r}_{ij}), pode-se calcular a sua posição relativa no início do contato ($\mathbf{r}_{ij}^{\{0\}}$) através de

$$\mathbf{r}_{ij}^{\{0\}} = \mathbf{r}_{ij} - \mathbf{v}_{ij} \Delta t_{ij}^{\{0\}}. \quad (5.7.4)$$

Então, sabendo-se que, no momento do toque, a distância entre os centros das partículas é igual à soma de seus raios (ou seja, $\|\mathbf{r}_{ij}^{\{0\}}\| = R_i + R_j$), tem-se que

$$\|\mathbf{r}_{ij}^{\{0\}}\|^2 = \|\mathbf{r}_{ij}\|^2 + 2(\mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{v}_{ij}) \Delta t_{ij}^{\{0\}} + (\|\mathbf{r}_{ij}\| \Delta t_{ij}^{\{0\}})^2 = (R_i + R_j)^2. \quad (5.7.5)$$

Desta forma, tem-se uma equação quadrática em $\Delta t_{ij}^{\{0\}}$ que pode ser utilizada para estimar o seu valor. A raiz fisicamente consistente da equação acima é dada por

$$\Delta t_{ij}^{\{0\}} = - \frac{\mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{v}_{ij} + \sqrt{(\mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{v}_{ij})^2 + \|\mathbf{v}_{ij}\|^2 [(R_i + R_j)^2 - \|\mathbf{r}_{ij}\|^2]}}{\|\mathbf{v}_{ij}\|^2}. \quad (5.7.6)$$

Na verdade, visto que \mathbf{v}_{ij} não é necessariamente constante, a estimativa acima pode resultar em um valor maior que Δt . Porém, como é sabido que as partículas não estavam em contato no instante $t - \Delta t$, substitui-se a expressão acima por

$$\Delta t_{ij}^{\{0\}} = \min \left[- \frac{\mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{v}_{ij} + \sqrt{(\mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{v}_{ij})^2 + \|\mathbf{v}_{ij}\|^2 [(R_i + R_j)^2 - \|\mathbf{r}_{ij}\|^2]}}{\|\mathbf{v}_{ij}\|^2}, \Delta t \right]. \quad (5.7.7)$$

No caso do contato entre uma partícula “i” e um obstáculo “k”, um raciocínio similar leva a

$$\tilde{\mathbf{F}}_{ik}^{(t)} = (k_{ik}^{(t)} \Delta t_{ik}^{\{0\}} + \eta_{ik}^{(t)}) \mathbf{v}_{ik}^{(c,t)}, \quad (5.7.8)$$

$$\text{onde } \Delta t_{ik}^{\{0\}} = \min \left[- \frac{\mathbf{r}_{ik}^{(c)} \cdot \mathbf{v}_{ik}^{(c)} + \sqrt{(\mathbf{r}_{ik}^{(c)} \cdot \mathbf{v}_{ik}^{(c)})^2 + \|\mathbf{v}_{ik}^{(c)}\|^2 (R_i^2 - \|\mathbf{r}_{ik}^{(c)}\|^2)}}{\|\mathbf{v}_{ik}^{(c)}\|^2}, \Delta t \right], \quad (5.7.9)$$

$$\mathbf{r}_{ik}^{(c)} = \mathbf{r}_k^{(c,i)} - \mathbf{r}_i \quad \text{e} \quad (5.7.10)$$

$$\mathbf{v}_{ik}^{(c)} = \mathbf{v}_k' + \boldsymbol{\omega}_k' \times \mathbf{q}_{ki}' - \mathbf{v}_i = \mathbf{v}_{ik}' + \boldsymbol{\omega}_k' \times (\mathbf{r}_k^{(c,i)} - \mathbf{r}_i'). \quad (5.7.11)$$

O critério adotado aqui para a escolha do valor Δt é baseado na Equação (5.5.15). A partir dela, calculam-se as durações de possíveis choques isolados entre todos os pares (inclusive os do tipo “partícula-obstáculo”) envolvidos na simulação e, então, denomina-se o menor entre todos estes valores como Δt_{\min} . Então, define-se Δt como uma fração de Δt_{\min} ou, em outras palavras, faz-se $\Delta t_{\min} = \Phi \Delta t$, onde Φ passa a ocupar o lugar de Δt como um parâmetro da simulação e é chamado de “número de passos por colisão” (embora esta denominação seja um tanto imprecisa).

5.8 – Implementação Computacional

A formulação descrita nas seções anteriores torna possível a construção de um código computacional para simulação de sistemas granulares. No presente trabalho,

utilizaram-se os recursos da linguagem Fortran-95 para a implementação um programa seqüencial, isto é, destinado a execução em um único processador. Muitas providências foram tomadas de modo a se buscar uma alta eficiência, haja vista o grande esforço computacional requerido em uma simulação deste tipo. De certa forma, a restrição a partículas esféricas, a adoção de modelos simples e a escolha do método de integração numérica se enquadram entre tais providências. Contudo, há outras medidas de grande importância, principalmente de caráter algorítmico, que merecem destaque.

A mencionada demanda computacional do DEM decorre, em sua maior parte, da necessidade de se lidar com pares, principalmente do tipo “partícula-partícula” (considerando-se que o número de partículas em uma simulação é usualmente muito maior que o número de obstáculos). A quantidade de possíveis pares em um sistema é igual a $N_p(N_p - 1)/2 + N_p N_{ob}$ (por exemplo, um sistema com 5000 partículas e 5 obstáculos contém 12.522.500 possíveis pares). Assim, uma simulação se tornaria impraticável se todos eles tivessem que ser examinados a cada ciclo de cálculo e/ou se as propriedades de todos eles precisassem ser armazenadas. No entanto, certos atributos físicos ou geométricos dos sistemas estudados, se considerados, podem evitar esforços desnecessários e, com isto, viabilizar o método. Um destes atributos é o fato de que os contatos entre partículas granulares estão sujeitos à 3ª Lei de Newton. Desta maneira, as forças e os torques envolvidos na interação de um par “ij” precisam ser calculados uma única vez a cada ciclo de cálculo, já que

$$\mathbf{F}_{ji} = -\mathbf{F}_{ij} \quad \text{e} \quad (5.8.1)$$

$$\boldsymbol{\tau}_{ji} = \mathbf{q}_{ji} \times \mathbf{F}_{ji} = (-R_j \hat{\mathbf{n}}_{ij}) \times (-\mathbf{F}_{ij}) = R_j \hat{\mathbf{n}}_{ij} \times \mathbf{F}_{ij}. \quad (5.8.2)$$

Portanto, em vez de se calcular, em seqüência, os resultantes (força e torque) sobre cada partícula, melhor é realizar todos os cálculos simultaneamente, varrendo-se o sistema par a par e acrescentando-se, caso a Condição (5.5.2) seja satisfeita, as forças e os torques calculados aos respectivos resultantes. Para se realizar tal varredura, é importante levar em conta que, devido à referida condição, cada partícula pode interagir apenas com um número reduzido de outras partículas que estejam ao seu redor. Tal como no caso do Método de Monte Carlo, a manutenção de listas de partículas vizinhas,

que indiquem os pares a serem examinados durante um ciclo de cálculos, pode reduzir drasticamente o esforço computacional do DEM. Há diversos algoritmos destinados a isto, alguns tradicionalmente utilizados em Simulação Molecular, tais como a Lista de Verlet e o Método de Células Indexadas (Allen e Tildesley, 1987, p. 147), e outros empregados em computação gráfica e no próprio DEM, como o algoritmo denominado *Bounding Box* (Cohen *et al.*, 1995) e outro baseado em estruturas de dados conhecidas como *Octrees* (Vemuri *et al.*, 1998). Nesta parte da tese, assim como nas simulações de Monte Carlo (Capítulos 3 e 4), utiliza-se o Método de Células Indexadas, que é particularmente eficiente para sistemas constituídos por partículas esféricas com estreita distribuição de tamanhos. Para isto, o espaço simulado é dividido em células cúbicas (ou quase cúbicas) com dimensão igual (ou um pouco superior) ao diâmetro da maior partícula e, para cada célula, cria-se uma lista das partículas cujos centros se encontram em seu interior. Com isto, garante-se que uma partícula é passível de interação somente com aquelas que pertencem à lista da mesma célula ou à de uma das 26 células adjacentes (ou menos de 26, no caso de células situadas na borda do domínio considerado). Todavia, em simulações dinâmicas nas quais a 3ª Lei de Newton se aplica, a busca de pares das partículas de uma determinada célula não requer a avaliação de todas as vizinhas a ela, mas para cada par de células vizinhas diametralmente opostas, escolhe-se uma para ser avaliada. Por exemplo, se forem verificadas as interações de suas partículas com as da célula localizada acima dela, não devem ser consideradas as partículas da célula abaixo, pois tais interações serão verificadas quando esta última estiver sob análise. Mais detalhes podem ser encontrados no Capítulo 3 da dissertação de mestrado do autor deste trabalho (Abreu, 2000, p. 44).

Em relação a pares do tipo “partícula-obstáculo”, a manutenção de listas de vizinhos seria mais complexa e, portanto, é abdicada. Realiza-se a varredura dos pares de forma direta, ou seja, em cada ciclo de cálculos de força são examinadas as interações de todas as partículas com todos os obstáculos (o que não compromete drasticamente a eficiência de uma simulação se $N_{ob} \ll N_p$). Sabe-se que uma partícula e um obstáculo somente interagirão se se satisfizer a Condição (5.6.5), cuja verificação exige o cálculo de $r_k^{(c,i)}$ (Seções 5.6.1 e 5.6.2). Porém, há casos em que é possível evitá-lo, o que representa uma valiosa economia de esforço. Por exemplo, uma partícula “i”

jamais atingirá um obstáculo plano “k” se o seu centro não estiver localizado no interior de um paralelepípedo centralizado em \mathbf{r}'_k , alinhado com o obstáculo e com dimensões iguais a $L_k^{\{u\}} + 2R_i$ (na direção de $\hat{\mathbf{u}}_k$), $L_k^{\{w\}} + 2R_i$ (na direção de $\hat{\mathbf{w}}_k$) e $2R_i$ (na direção de $\hat{\mathbf{u}}_k \times \hat{\mathbf{w}}_k$, ou seja, normal ao obstáculo). Em outras palavras, um obstáculo plano “k” não exercerá nenhuma influência sobre uma partícula “i” se

$$|\mathbf{r}'_{ki} \cdot \hat{\mathbf{u}}_k| > \frac{L_k^{\{u\}}}{2} + R_i \quad \text{ou} \quad |\mathbf{r}'_{ki} \cdot \hat{\mathbf{w}}_k| > \frac{L_k^{\{w\}}}{2} + R_i \quad \text{ou} \quad |\mathbf{r}'_{ki} \cdot (\hat{\mathbf{u}}_k \times \hat{\mathbf{w}}_k)| > R_i. \quad (5.8.3)$$

No caso de um obstáculo cônico “k”, o cálculo de $\mathbf{r}_k^{\{c,i\}}$ será desnecessário se o centro da partícula “i” estiver fora de uma casca cilíndrica centralizada em \mathbf{r}'_k , com eixo na direção de $\hat{\mathbf{u}}_k$, altura igual a $L_k + 2R_i$ e raios externo e interno dados por

$$R_{ik}^{\{\text{ext}\}} = \max \left[R_k^{\{a\}}, R_k^{\{p\}} \right] + R_i \quad \text{e} \quad (5.8.4)$$

$$R_{ik}^{\{\text{int}\}} = \max \left[0, \min \left[R_k^{\{a\}}, R_k^{\{p\}} \right] - R_i \right]. \quad (5.8.5)$$

Conseqüentemente, a força exercida sobre uma partícula “i” por um obstáculo cônico “k” será necessariamente nula se

$$|\mathbf{r}'_{ki} \cdot \hat{\mathbf{u}}_k| > L_k / 2 + R_i \quad \text{ou} \quad \|\boldsymbol{\alpha}_{ik}\| > R_{ik}^{\{\text{ext}\}} \quad \text{ou} \quad \|\boldsymbol{\alpha}_{ik}\| < R_{ik}^{\{\text{int}\}}. \quad (5.8.6)$$

Outra dificuldade reside no armazenamento das variáveis relativas a pares que precisam ser acessadas a cada passo de integração, tais como os parâmetros de interação ($k_{ij}^{\{n\}}$, $\eta_{ij}^{\{n\}}$, $k_{ij}^{\{t\}}$, $\eta_{ij}^{\{t\}}$, μ_{ij} , $k_{ik}^{\{n\}}$, $\eta_{ik}^{\{n\}}$, $k_{ik}^{\{t\}}$, $\eta_{ik}^{\{t\}}$ e μ'_{ik}). Neste caso, alguma medida deve ser tomada para se viabilizar o uso de memória. Uma solução prática consiste na definição de grupos de partículas, de modo que todas aquelas pertencentes a um dado grupo tenham propriedades idênticas (como raio e densidade) e interajam igualmente com qualquer partícula de um outro grupo. Assim, armazenam-se parâmetros relativos a pares de grupos, e não a pares de partículas (no caso de um sistema monodisperso, por exemplo, necessita-se armazenar um único valor de cada parâmetro). Além disto, pode-

se substituir o modelo para a força elástica normal esquematizado na Figura 5.5.2, com uma única mola, por aquele exposto na Figura 5.8.1, com duas molas dispostas em série e com constantes específicas $k_i^{\{n\}}$ e $k_j^{\{n\}}$, cada uma relacionada à respectiva partícula. Neste caso, $k_i^{\{n\}}$ recebe a denominação de **rigidez** (*stiffness*) de uma partícula “i”. Com isto, embora a expressão para $\mathbf{F}_{ij}^{\{n,e\}}$ não se altere [Equação (5.5.6)], a constante de mola relativa ao par “ij” passa a ser dada por

$$k_{ij}^{\{n\}} = \frac{k_i^{\{n\}} k_j^{\{n\}}}{k_i^{\{n\}} + k_j^{\{n\}}}. \quad (5.5.7)$$

Assim, obtém-se um parâmetro de par como uma combinação de parâmetros individuais. O mesmo se faz para os pares “partícula-obstáculo”, definindo-se $k_k^{\{n\}}$ como a rigidez de um obstáculo “k”.

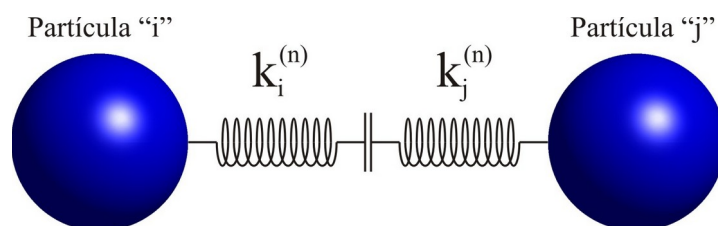


Figura 5.8.1 – Modelo com duas molas para força elástica normal.

Outras variáveis que devem ser acessadas a cada passo de integração são aquelas empregadas no cálculo das forças tangenciais, ou seja, todas as $\mathbf{F}_{ij}^{\{t\}}$, $\mathbf{V}_{ij}^{\{c,t\}}$, $\mathbf{F}_{ik}^{\{t\}}$ e $\mathbf{V}_{ik}^{\{c,t\}}$ referentes aos pares que estavam em contato no passo precedente. A forma direta de armazená-las seria em *arrays* de índice duplo, mas isto constituiria uma redundância no uso de memória, visto que apenas uma pequena fração do total de pares pode realizar contato em determinado instante. Existem, na literatura, descrições sobre estruturas de dados específicas para o tratamento de matrizes deste tipo, ditas esparsas, nas quais se armazenam somente os elementos úteis. Para uso no DEM, além de acesso rápido aos pares de interesse, a estrutura deve permitir uma contínua adição e remoção de elementos, haja vista as formações e rompimentos de contatos que se dão ao longo de uma simulação. Cundall (1988) descreveu uma estrutura deste tipo aplicada a sistemas

formados por partículas poliédricas, mas aplicável também a sistemas de esferas. No entanto, optou-se por desenvolver uma estrutura própria, mais simples e que requer menor quantidade de memória. Elaborou-se também um algoritmo que visa tornar mais eficientes a busca, a inserção e a remoção de pares em tal estrutura, cuja descrição se segue. Para uma dada partícula “i”, associam-se duas listas encadeadas, sendo uma de partículas e outra de obstáculos em contato com ela. Cada elemento destas listas contém um índice para assinalar qual o parceiro de “i” a que se refere, além de dois vetores para conservar as devidas força e velocidade calculadas no passo anterior, e um ponteiro para indicar o elemento seguinte da lista. Para se evitar duplo armazenamento de pares, somente partículas com índice maior que “i” podem constar na lista de parceiras de “i” (cabe frisar que, no caso da lista de obstáculos, esta restrição não é necessária). Além disto, visando-se facilitar a busca de pares, os elementos de uma lista são dispostos em ordem crescente de índices. Pode-se compreender melhor esta descrição com o auxílio da Figura 5.8.2, que mostra um sistema composto por seis partículas e três obstáculos, juntamente com a estrutura de dados a ele associada.

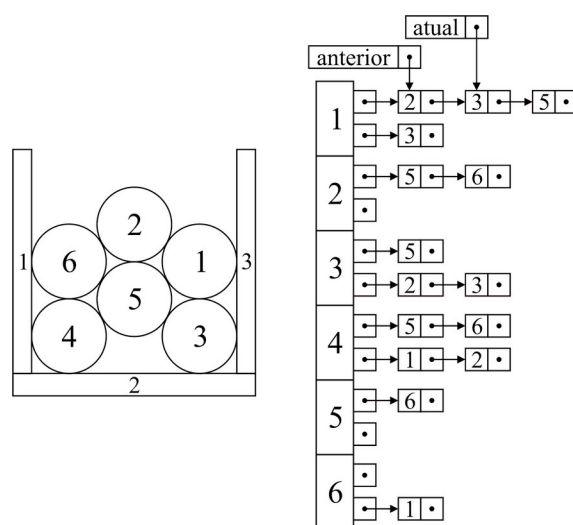


Figura 5.8.2 – Estrutura de dados para armazenar propriedades de pares em contato.

Por exemplo, para se constatar se a partícula “3” realizava contato com a partícula “1” no passo anterior, deve-se efetuar uma busca na lista de parceiras desta última (por ser ela a de menor índice). Assim, utilizando-se um ponteiro, percorre-se tal lista até se encontrar um elemento com índice “3”, ou com índice maior que “3”, ou até se ultrapassar o último elemento da lista. Nos dois últimos casos, verifica-se que o referido

contato não existia no passo precedente. Já no primeiro caso, não somente se conclui que ele existia, como também se tem acesso às suas propriedades de interesse. Na Figura 5.8.2, o elemento que as contém é indicado pelo ponteiro “atual”, que é o mesmo utilizado para o percurso através da lista.

A maneira de se contabilizar, em determinado instante t , as forças de interação entre duas partículas “i” e “j” depende de duas condições: (A) se tais partículas se encontram em contato no instante t e (B) se elas estavam em contato no instante $t - \Delta t$. A Condição (A) corresponde à Desigualdade (5.5.2), enquanto a Condição (B) pode ser verificada por meio do procedimento exposto no parágrafo anterior. Se a primeira for verdadeira, calcula-se a força normal ($F_{ij}^{(n)}$) através da Equação (5.5.6), independentemente da segunda. Por outro lado, os procedimentos para cálculo da força tangencial ($F_{ij}^{(t)}$) dependem da combinação entre as duas condições. Tais procedimentos estão descritos na Tabela 5.8.1. Nesta, menciona-se um ponteiro denominado “anterior” (Cf. Figura 5.8.2) que, durante a busca ao longo de uma lista, deverá tomar o lugar de “atual” toda vez que este for avançar um elemento. No início da busca, ou seja, quando “atual” apontar para o primeiro elemento da lista, “anterior” deve ser nulo. Com isto, torna-se possível executar as inserções e remoções que constam na Tabela 5.8.1, através de procedimentos padrões de manipulação de listas encadeadas, sem a necessidade de se percorrer novamente a lista, o que contribui para a eficiência do algoritmo. No caso da interação entre uma partícula e um obstáculo, a analogia é direta.

A remoção de cada par que tenha rompido o contato desde o último passo, além de promover uma utilização eficaz da memória do computador, permite que a força tangencial seja calculada de forma correta se o mesmo par voltar a interagir no futuro. Há neste ponto, porém, uma reconhecida possibilidade de falha. Como os pares de partículas analisados são indicados pelas listas de vizinhas, ocorre que, se duas delas romperem o contato e deixarem de pertencer a células adjacentes em um mesmo passo de integração, como ilustrado na Figura 5.8.3, elas não serão analisadas no passo seguinte e, portanto, a informação sobre o seu contato permanecerá na estrutura de dados até que, no futuro, elas retomem a condição de vizinhança. Se, porém, neste mesmo passo em que elas voltarem a se tornar vizinhas, também for retomado um novo

contato (situação inversa à da Figura 5.8.3), o algoritmo agirá como se este fosse uma continuação do contato anterior. No entanto, a probabilidade de ocorrência desta sequência de fatos é muito pequena, podendo ser ignorada sem prejuízos. Tal probabilidade diminui ainda mais se a dimensão das células for um pouco maior que o diâmetro da maior partícula, como sugerido anteriormente.

Tabela 5.8.1 – **Procedimentos para cálculo de forças tangenciais.**

Condição (A)	Condição (B)	Procedimentos
		- Recuperar $\mathbf{F}_{ij}^{(t)}$ e $\mathbf{v}_{ij}^{(c,t)}$
Verdadeira	Verdadeira	- Calcular $\mathbf{F}_{ij}^{(t)}$ através das Equações (5.5.29) e (5.5.31) - Armazenar $\mathbf{F}_{ij}^{(t)}$ e $\mathbf{v}_{ij}^{(c,t)}$ no elemento apontado por “atual”*
Verdadeira	Falsa	- Calcular $\mathbf{F}_{ij}^{(t)}$ através das Equações (5.5.29) e (5.7.3) - Inserir um elemento com $\mathbf{F}_{ij}^{(t)}$ e $\mathbf{v}_{ij}^{(c,t)}$ após o apontado por “anterior”, se houver, ou antes da primeira posição da lista*
Falsa	Verdadeira	- Remover o elemento apontado por “atual”*
Falsa	Falsa	Nada a fazer

* Procedimento realizado apenas na etapa de predição, pois não se avança no tempo na etapa de correção.

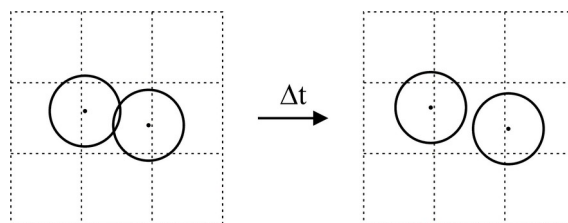


Figura 5.8.3 – Rompimento do contato e da condição de vizinhança entre duas partículas em um mesmo passo de integração.

Para finalizar as discussões sobre o *software* implementado nesta segunda parte da tese, convém expor alguns detalhes adicionais. Um deles diz respeito às unidades das grandezas envolvidas. Embora o usuário possa fornecer os parâmetros com unidades usuais, como as do Sistema Internacional (SI), convém realizar os cálculos com unidades próprias, de forma a se evitar a manipulação de valores muito altos ou muito baixos. Então, adota-se como unidades fundamentais o diâmetro da menor partícula (comprimento), a massa da partícula mais leve (massa) e a duração mínima [Equação

(5.5.15)] entre todas as possíveis colisões (tempo). As demais unidades são obtidas como combinações destas três.

Um outro detalhe que merece destaque é que o programa foi estruturado de forma que o número de partículas possa variar durante uma simulação. Isto facilita, por exemplo, a simulação da carga ou da descarga de um recipiente. Outra vantagem desta possibilidade é habilitar o programa a futuros desenvolvimentos em plataformas de processamento paralelo. Por exemplo, em um equipamento de múltiplos processadores, cada um deles pode ficar responsável pela simulação de uma determinada região do espaço. Quando uma partícula migrar de uma região para outra, deve-se “removê-la” do programa executado em um determinado processador para “inseri-la” em outro. Este estilo de paralelização é conhecido como “decomposição espacial” (Heffelfinger, 2000). No entanto, vale enfatizar que esta não seria a única característica adicional de um programa paralelo para execução do DEM. É necessário, outrossim, considerar que partículas situadas nas proximidades da fronteira de uma região podem interagir com outras localizadas em regiões adjacentes, de modo que informações sobre elas devem ser compartilhadas entre os respectivos processadores.

Por fim, um *software* suplementar foi desenvolvido para a geração de animações tridimensionais a partir de seqüências de configurações obtidas em simulações com o programa principal. Para isto, utilizou-se o pacote Matlab®, versão 6.5, que possui uma interface com a biblioteca de computação gráfica OpenGL, permitindo a criação de imagens estáticas tridimensionais, e possibilita a conjunção destas imagens em arquivos multimídia do tipo AVI (*audio-video interleaved*).